

Diseño óptimo de la cadena de suministro europea para captura, transporte, almacenamiento y reutilización de CO₂



Máster en Ingeniería Química

Trabajo Fin de Máster

Autor:

Iván Mataix Borrell

Tutor/es:

José Rubén Ruiz Femenía

José Antonio Caballero Suarez

Julio 2021



Universitat d'Alacant
Universidad de Alicante

Índice

Resumen.....	3
Abstract	3
1. Introducción	4
1.1. Principales fuentes de CO ₂	5
1.2. Tecnologías de captura, almacenamiento y uso de CO ₂ (CCS/CCUS).....	7
1.3. Modelos matemáticos sobre la optimización de una CS para la CCUS.....	10
2. Objetivos	11
3. Planteamiento del problema	12
3.1. Fuentes de emisión.....	12
3.2. Captura	13
3.3. Transporte	14
3.4. Secuestro	14
3.5. Utilización	15
4. Descripción del modelo.....	16
4.1. Modelo de captura.....	17
4.2. Modelo de transporte.....	18
4.3. Modelo de secuestro.....	20
4.4. Modelo de utilización.....	21
5. Resultados	24
5.1. Diferencias respecto a los artículos d'Amore 2017 y d'Amore 2020.	24
5.2. Optimización red de suministros CCUS para España, utilizando 3 modos de transporte.....	25
5.3. Influencia del límite mínimo de captura de CO ₂ impuesto por la UE (α).	27
5.4. Optimización red de suministros CCUS y comprobación con el artículo de d'Amore (2020). Escenarios (A-C)	29
5.4.1. Escenario A	31
5.4.2. Escenario B	35
5.4.3. Escenario C	36
5.5. Influencia del límite mínimo de reducción de CO ₂ impuesto por la UE (α).	37
6. Discusión y limitaciones.	40
7. Conclusión.....	41
8. Bibliografía	42
9. Notación	48
10. Apéndices.....	53
10.1. Base de datos Emisiones para la Investigación Atmosférica Global (EDGAR).	53

10.2.	Cálculo de la distancia lineal entre la región g y g' ($LD_{g,g'}$) a partir de longitud y latitud.	54
10.3.	Cálculo del coste unitario de transporte $UTC_{p,l}$ [$\text{€/tCO}_2/\text{km}$]	55
10.4.	Tablas	57
10.5.	Gráficas complementarias España y Europa.	68
10.6.	Tablas complementarias	73

Resumen

La captura y almacenamiento de carbono (CCS) se ha convertido en una de las opciones más prometedoras para disminuir las emisiones de los gases de efecto invernadero (GEI). Además, el uso de este carbono se ha considerado como un beneficio tanto para el medio ambiente, como para la reducción del coste total de instalación de los sistemas de CCS. Cuando se trata del diseño y optimización de una infraestructura de captura, almacenamiento y uso de CO₂ («Carbon Capture, Usage and Storage», CCUS) a gran escala, es necesario emplear herramientas matemáticas para tratar la complejidad de esta red. En el presente trabajo, se propone un modelo de programación lineal mixta entera (MILP) para la optimización económica de una cadena de suministro a pequeña y gran escala de una CCUS. El territorio europeo ha sido discretizado con el fin de obtener una definición espacial de las grandes fuentes de emisiones estacionarias. En cuanto a la captura de CO₂, la postcombustión, la oxicomustión y la precombustión han sido consideradas como posibles tecnologías de captura, mientras que a nivel de transporte se ha diferenciado entre oleoducto tierra, oleoducto mar y barco. En base a los datos existentes en la literatura, la conversión del CO₂ a PPP y MeOH fue seleccionada como una de las tecnologías prometedoras en la utilización del carbono. Diferentes escenarios (capturando hasta el 90% de las emisiones europeas de CO₂ de grandes fuentes estacionarias) han sido analizados y comentados. Los resultados demuestran el potencial de las tecnologías de captura y almacenamiento de carbono; mientras que, según nuestras suposiciones, la utilización del carbono en términos de reducción del impacto ambiental no es suficiente teniendo en cuenta que actualmente sólo el 2.4% del CO₂ capturado es eliminado mediante la conversión a productos químicos. Los costes de captura son la principal contribución al coste total, mientras que los costes de transporte y secuestro no superan el 10% de la inversión inicial necesaria. Sin embargo, se pueden obtener importantes beneficios en términos de reducción del coste total debido a los ingresos derivados de los productos químicos que se producen.

Abstract

Carbon capture and storage (CCS) is one of the most innovative technologies to counteract the emission of greenhouse gases (GHG). Not only carbon utilization is beneficial for the environment but also a way to reduce the cost of the mere capture and storage system. Mathematical modelling tools are needed to design and optimize carbon capture, storage, and utilization (CCUS) on a large scale.

In this MSc Thesis, mixed-integer linear programming models (MILP) are utilized for CCUS supply chain optimization at small and large scale. In the model, the European territory is discretized to allow for a spatially explicit definition of large emission clusters. Post-combustion, pre-combustion and oxyfuel combustion are included as possible capture technologies, while both pipelines and ships are described as potential transport means. As utilization factor, the conversion

of CO₂ into methanol and polyether carbonate polyols (PPP) is incorporated. Several scenarios (capturing up to 90% of European CO₂ emissions) are analysed and discussed. The results show that CCUS are promising technologies to reduce free GHG in the atmosphere. However, considering our assumptions, only 2.4% of the overall CO₂ emitted can be removed by chemical utilization. Capture costs are the major contributors to the overall cost whereas transport and sequestration costs are less than 10% of the initial investment. On the bright side, chemicals production revenues contribute significantly to the reduction of the total cost of the process.

1. Introducción

La crisis climática sigue siendo el desafío que caracteriza nuestra era. Los últimos 5 años han sido los más calurosos que se hayan registrado. La generación de gases de efecto invernadero (GEI), principalmente constituidos por CO₂, CH₄, N₂O y gases fluorados han experimentado un aumento exponencial provocando un incremento de la temperatura media mundial de 1.1°C en comparación con los niveles registrados en el periodo pre-industrial. De todos los GEI emitidos, el CO₂ es el más abundante y sus emisiones totales a nivel mundial han aumentado de 2 Gt/año en 1990 hasta 35 Gt/año en 2010 [1]. Este incremento de las emisiones de GEI se debe principalmente a tres causas: el crecimiento de la población, el crecimiento de la economía mundial y la pérdida de eficiencia por parte de la naturaleza para absorber, reflejar y emitir CO₂ [1].

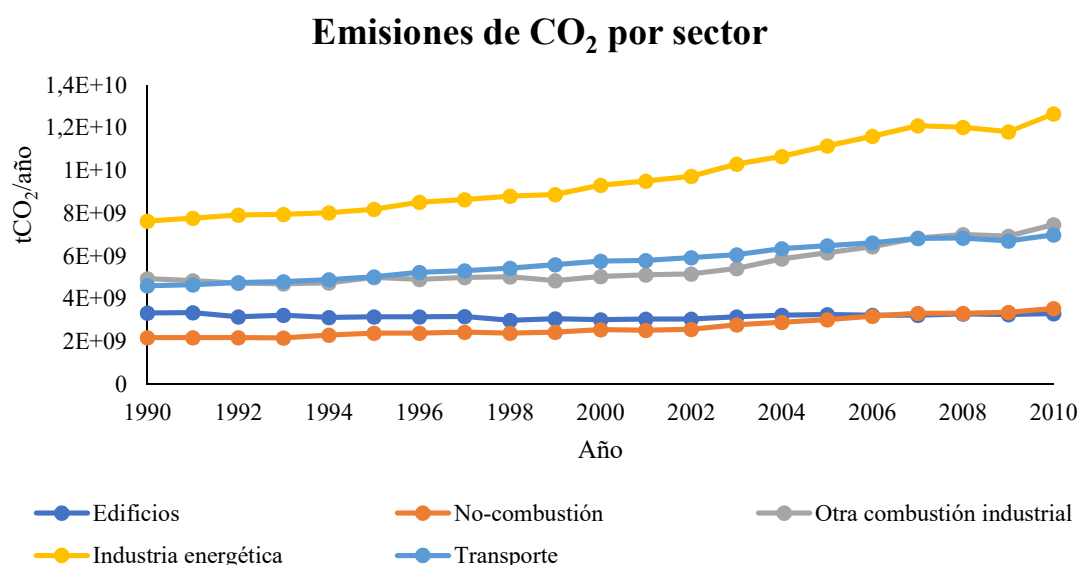


Figura 1. Evolución de las emisiones de CO₂ mundiales desde 1990 hasta 2010 por sectores. Tomado de la base de datos EDGAR [4].

Los informes recientes del IPCC (del inglés, *Intergovernmental Panel on Climate Change*) relativos al cambio climático y al calentamiento global de 1.5°C de la tierra, los océanos y la criosfera, subrayaron las graves consecuencias que tendría no frenar este fenómeno en los

próximos 10 años. Por ello, la presidenta de la Comisión Europea (EC) ha establecido un Pacto Verde Europeo con el objetivo de transformar la Unión Europea (UE) en una sociedad justa y próspera con una economía moderna, eficiente en el uso de los recursos y competitiva. Debemos proteger, preservar y fortalecer la biodiversidad de la UE, proteger la salud y el bienestar de los ciudadanos y garantizar una transformación inclusiva basada en una transición justa con el fin de alcanzar la neutralidad climática de aquí a 2050 [2].

Si bien es cierto, que el mundo actual atraviesa una crisis sanitaria, la COVID-19, con un impacto socioeconómico sin precedentes, hecho que requiere una atención urgente, pero nuestros esfuerzos para hacer frente a una crisis no deben acelerar ni empeorar otras. Ya que, posponer la acción por el clima o reducir las medidas no es una alternativa que la Unión Europea se plantee. Si no se controla, la crisis climática que se está produciendo tendrá consecuencias importantes para nuestro entorno natural, nuestra salud y nuestros medios de subsistencia, en mucha mayor medida que la actual crisis sanitaria [2].

En la próxima década, la UE seguirá avanzando en una sólida trayectoria de acción por el clima, y el crecimiento económico. En 2019, las emisiones de la UE se redujeron cerca del 25% en comparación con 1990, si bien la economía creció un 62% a lo largo del mismo periodo. Este hecho demuestra que podemos combatir el cambio climático y garantizar un crecimiento económico y una creación de empleo constantes en el tiempo; demostrando que una reducción de las emisiones del 55% para el 2030, en comparación con los niveles de 1990, resulta factible económicamente como beneficiosa para Europa. Las previsiones muestran que, con solo seguir aplicando la legislación en vigor, la UE podría alcanzar sólo una reducción del 60% de las emisiones de gases de efecto invernadero de aquí a 2050. Por lo que se deben incrementar las ambiciones en esta década y evitar que las generaciones futuras tengan que asumir una mayor carga de trabajo [2].

1.1.Principales fuentes de CO₂

En el mundo pueden identificarse casi 7.500 grandes fuentes estacionarias de emisiones de CO₂, lo que supone más de 10⁵ toneladas de CO₂ al año. Entre ellas se contabilizan más de 2.000 plantas alimentadas con carbón, seguidas de 1.700 instalaciones alimentadas con gas natural, 1.200 industrias cementeras y otras [3].

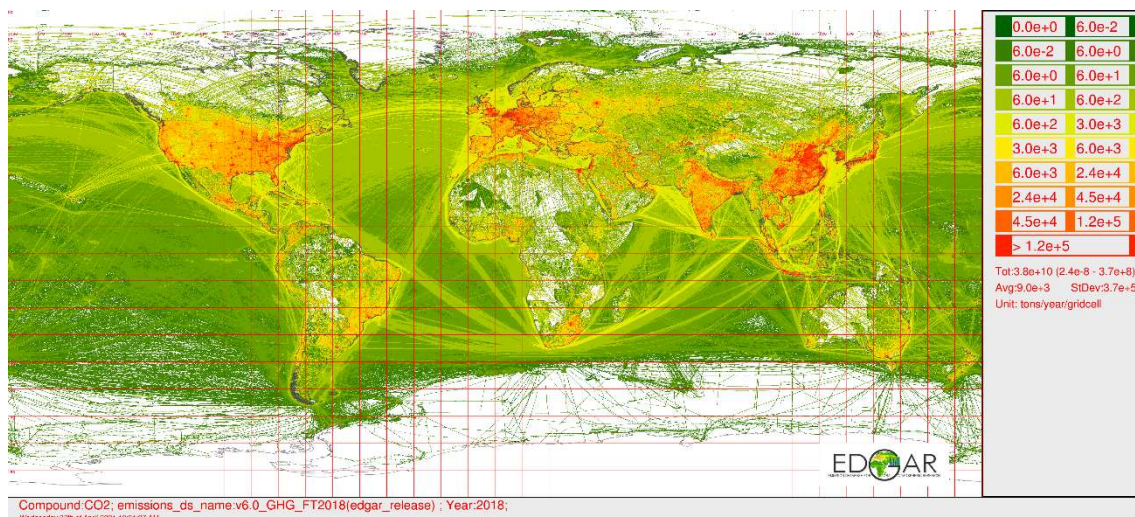
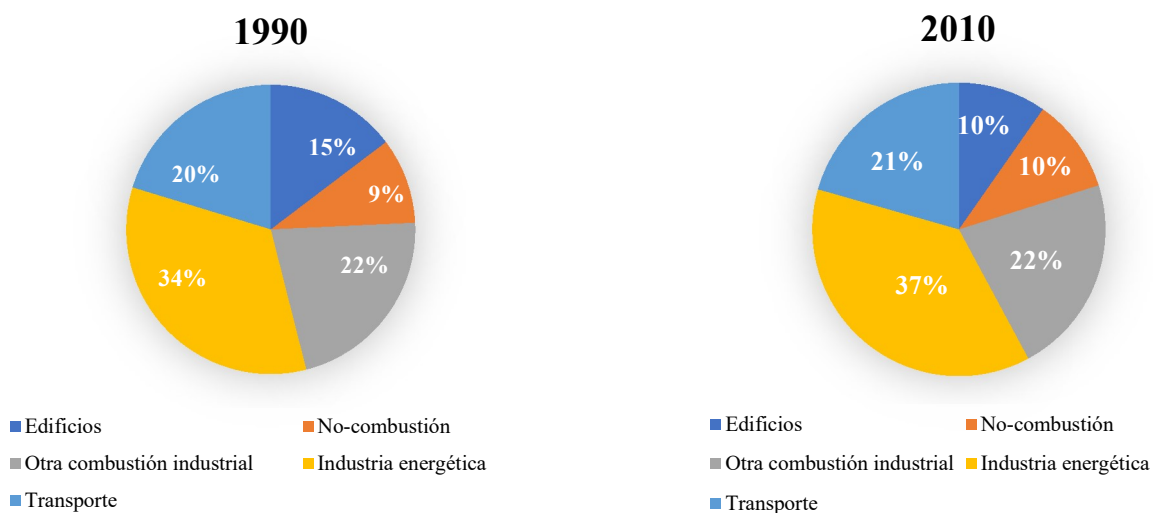


Figura 2. Fuentes de emisiones estacionarias mundial en el año 2018. Base de datos EDGAR [4].

Estas fuentes se identifican en cuatro sectores principales: la generación de electricidad (36%), seguido de las actividades industriales (22%), transporte (21%), edificios (10%) y otras emisiones (10%). En la Figura 3, podemos observar la evolución de la contribución de dichos sectores a los largo del tiempo, cabe destacar que el sector que siempre ha tenido mayor contribución llegando casi al 40% en el año 2010, es la generación de electricidad.



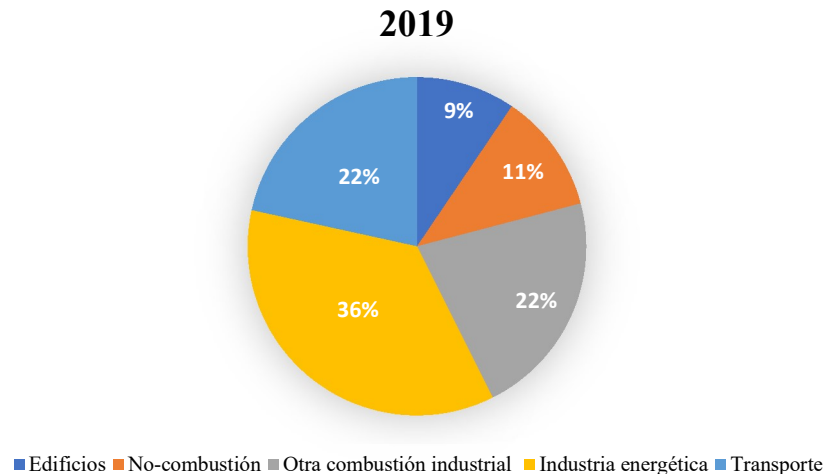


Figura 3. Evolución de la contribución de los sectores sobre las emisiones mundiales totales de CO₂ desde 1990 hasta 2019.

En Europa las grandes fuentes representan el 42% de las emisiones estacionarias de CO₂ (> 10⁴ toneladas de CO₂/año), mientras que las fuentes muy grandes emiten el 37% del CO₂ (> 10⁵ toneladas de CO₂/año) global europeo [4].

1.2. Tecnologías de captura, almacenamiento y uso de CO₂ (CCS/CCUS)

La captura, almacenamiento y utilización del CO₂ (*Carbon Capture, Utilization and Storage of CO₂, CCUS*) surgió como una posible solución complementaria para paliar las emisiones globales de CO₂. Por un lado, se captura CO₂ y su contribución al cambio climático se elimina [7]. El esquema de la CCUS se compone de cuatro etapas: captura, transporte, almacenamiento y utilización [3]. La primera etapa, se basa en separar el CO₂ de los otros gases de una corriente de proceso. Existen tres tecnologías para capturar CO₂ del uso de combustibles fósiles:

- **Captura de postcombustión:** separa el CO₂ de los gases de combustión de un combustible fósil. Los sistemas de referencia donde es conveniente aplicar la tecnología de captura de postcombustión carbón/gas son las centrales eléctricas de carbón pulverizado y los ciclos combinados de gas natural. Existen diferentes tecnologías capaces de llevar a cabo esta separación, las opciones más demandadas son los procesos de absorción y membranas. Los procesos de absorción ofrecen alta eficiencia y selectividad de captura, con una recuperación entre el 80% - 95% del CO₂ [3].
- **Captura de combustión de oxi-combustible:** basado en un proceso de separación de aire de precombustión, con el fin de obtener una combustión de oxígeno casi puro. El gas de combustión contiene altas concentraciones de CO₂ (80%-98%), se comprime, se seca y se purifica para su transporte y almacenamiento. Dicha tecnología se considera como una alternativa para las plantas a base de carbón ya que su aplicación a las plantas alimentadas de gas natural todavía se encuentra en desarrollo [3].

- **Captura de precombustión:** se trata de una tecnología basada en la producción de un gas de síntesis rico en hidrógeno, dicha tecnología presenta una ventaja respecto a la postcombustión, ya que permite la obtención de una mayor concentración de CO₂ en la corriente de salida, dando lugar a una etapa de separación más pequeña y económica [6].

Posteriormente, el flujo de CO₂ es purificado y comprimido para transportarlo a formaciones geológicas subterráneas. En particular, el CO₂ puede ser transportado en tres estados: gas comprimido, líquido y sólido [3]. El tercer eslabón de la cadena de suministros de la CCUS es el almacenamiento mediante la inyección debajo de la superficie terrestre. Por otro lado, en lugar de recurrir al almacenamiento, el gas se valoriza. Este CO₂ puede usarse en aplicaciones industriales donde se necesita el gas, ya sea como reactivo en la síntesis de productos de valor añadido (uso indirecto) o físicamente (uso directo), donde actúa como medio (disolvente, atmósfera inerte) o aditivo, sin sufrir ninguna transformación química [7]. Algunos usos directos del gas incluyen procesos de separación, sustitución de disolventes orgánicos, como aditivo en la industria alimentaria y la extracción de petróleo o gas natural. La aplicación más relevante del CO₂ en la industria del petróleo y gas es la llamada recuperación mejorada de petróleo (*Enhanced Oil Recovery*, EOR), y que actualmente es el mayor sumidero antropógeno de CO₂ [8]. La inyección del gas en el depósito forma una mezcla con el petróleo. Esta mezcla es capaz de recuperar entre un 15-30% adicional del contenido total del crudo original. Además, 40 – 50% del CO₂ permanece permanentemente en el depósito [9]. El dióxido de carbono también se puede utilizar de manera similar para recuperar gas natural (*Enhanced Gas Recovery*, EGR). La inyección en el pozo produce un aumento de presión que facilita la extracción del combustible y, al igual que en la extracción de petróleo, la mayor parte del CO₂ puede almacenarse en el depósito en sustitución del gas natural.

La llamada utilización indirecta del CO₂ comprende los usos que implican una transformación química del gas para obtener un producto de valor añadido. La lista de los compuestos más sintetizados, así como su consumo de CO₂, se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1: Productos químicos más importantes que utilizan CO₂ como materia prima [10,11].

Compuesto	Producción [kt/año]	CO ₂ usado [kt/año]
Urea	155	114
Metanol	50	8
Carbonatos	0.2	0.005
Policarbonatos (PPP)	4	0.01
Carbonatos inorgánicos	200	50
Total		178

La mayor demanda de CO₂ como reactivo se da en la producción de Urea, donde el CO₂ reacciona con amoníaco, que es producido por la reacción de hidrógeno y nitrógeno a 400-500°C y a más de 100 bares en el proceso Haber-Bosch. La mayor parte de este CO₂ es suministrada por el proceso de producción de hidrógeno como subproducto. Mas del 90% de la producción mundial de urea se usa como fertilizante tal cual o en la síntesis de otros fertilizantes.

Otro producto básico en cuya producción se utiliza CO₂ como materia prima es el metanol. El metanol se produce de forma clásica a partir de gas de síntesis a 250-300°C y 50-100 bares [12]. Además, no menos de un 3% de la composición del gas de síntesis debe estar constituida por CO₂. El dióxido de carbono también se utiliza para la producción de policarbonatos utilizados para la producción de poliuretanos uno de los polímeros más utilizados a nivel mundial.

Sin embargo, y como han señalado otros autores, para que la utilización de CO₂ como materia prima llegue a convertirse en una herramienta que contribuya de manera significativa a la lucha contra el cambio climático, todavía es necesario aumentar considerablemente la escala de producción de los procesos alimentados por CO₂ [13].

Ante la amenaza del cambio climático, además de las tecnologías y procesos creados, se hace imprescindible la aportación de los gobiernos, de políticas encaminadas a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Una de estas políticas, basada en el comercio de derechos de emisión, pretende reducir las emisiones globales de CO₂ al mismo tiempo que representa un incentivo económico para las empresas que mantengan sus emisiones por debajo del límite establecido. Esta política ya ha sido adoptada por la Unión Europea, que en el año 2005 puso en marcha el sistema EU ETS (del inglés, *European Union Emissions Trading System*) [14], que limita las emisiones de más de 11.000 plantas de generación de calor y electricidad, como por ejemplos las instalaciones industriales (producción de cemento, refinerías, industria del hierro y el acero e industria petroquímica). En total, este sistema cubre alrededor del 45% de las emisiones de gases de efecto invernadero de la UE [15]. Este sistema funciona según el principio de “limitación y comercio”, que consiste en la imposición de un límite máximo a la cantidad de gases de efecto invernadero que las empresas participantes pueden emitir. Este límite va disminuyendo con el tiempo a fin de que las emisiones totales disminuyan. Dentro de este límite, los gobiernos asignan a cada empresa, unos derechos de emisión, con los que las empresas pueden comerciar en función de sus necesidades. Al final de cada año, las empresas deben entregar suficientes derechos para cubrir todas sus emisiones. En caso contrario, se les imponen fuertes sanciones. Si una empresa reduce sus emisiones, puede conservar sus derechos sobrantes para cubrir necesidades futuras, o bien venderlas a otra empresa. Según la Directiva Europea, al menos el 50% de los beneficios de la venta de derechos de emisiones se deben destinar a acciones relacionadas con el clima y la energía [16]. Las autoridades de las zonas que han implementado

este sistema o prevén hacerlo participan en un foro internacional ICAP (del inglés *International Carbon Action Partnership*) cuyo fin último es la creación de un mercado mundial de carbono [17].

1.3. Modelos matemáticos sobre la optimización de una CS para la CCUS.

Durante la última década, la Unión Europea ha financiado varios proyectos para evaluar los costes y rendimientos de sistemas a gran escala para la captura de CO₂ [18], transporte [19] y almacenamiento [20]. En particular se ha investigado el potencial de una infraestructura de CCS europea integral a través de una serie de plantas de demostración en diferentes países [21]. Este aumento de la investigación sobre CCS y CCUS ha proporcionado el incremento de los conocimientos tecno-económicos de cada una de las etapas de la cadena de suministros (CS) [22]. Esto ha derivado en la necesidad de investigar el diseño, el coste y la integración de las etapas CCS/CCUS para diferentes contextos geográficos [6] a través de técnicas de programación lineal entera mixta (MILP).

En el año 2012 se optimizó una CS CCS para Corea del Norte a través de la formulación MILP bajo incertidumbre en los precios de mercado [23], mientras que, de nuevo para Corea del Norte, se optimizó dicha cadena de suministro teniendo en cuenta la incertidumbre de los datos [24]. Del mismo modo, pero en este caso para Texas se propuso un modelo MILP para CCS que también tuvo en cuenta la incertidumbre en las características geológicas del almacenamiento [25]. Posteriormente, se realizó el mismo caso para Alberta, Canadá [26]. Otra optimización MILP CCS fue publicada para el Reino Unido [27], que posteriormente se actualizó al incluir también la incertidumbre en los precios del carbono [28]. Del mismo modo, en el 2016 se propuso un marco de modelado CCS SC para el contexto de los Países Bajos [29]. En el año 2017 optimizaron una CCS SC a nivel europeo [30], posteriormente se realizó la misma optimización considerando el riesgo de fuga relacionado con el transporte por tubería [31] y fué en el año 2020 los mismos autores optimizaron una CCS CS teniendo en cuenta los aspectos de aceptación social y percepción del riesgo [32]. En el 2018 propusieron una herramienta teórica de modelado MILP para la optimización de sistemas CCS teniendo en cuenta tanto las características geográficas de los nodos de almacenamiento como la incertidumbre de los costos [33].

El primer modelo de optimización CS CCUS fue propuesto en 1987, el cual incluía la posibilidad de emplear el CO₂ capturado para la recuperación mejorada de petróleo (EOR) en Ohio (Estados Unidos) como alternativa al almacenamiento geológico [34]. En 2010, se adoptó un enfoque similar para una infraestructura ubicada en Noruega [35]. Cinco años más tarde volvieron a tener en cuenta el EOR como la única opción de utilización del CO₂ posible [36]. En el año 2018 se propuso un modelo de optimización para CCUS ubicado en Turquía, donde nuevamente, solo se adoptó EOR como opción para la utilización del dióxido de carbono [37].

Un número aún más limitado de contribuciones científicas optimiza los sistemas CCUS considerando la conversión y utilización de CO₂ para generar productos valiosos. En el año 2013 y 2019 consideraron la conversión de CO₂ en biobutanol o polímeros verdes como una alternativa al almacenamiento geológico dentro de un marco integral de modelado CCUS en el ámbito geográfico de Corea del Sur [38] y [39]. Ese mismo año optimizaron un CCUS SC a través de una herramienta de modelado MILP que incluía la posibilidad de producir metanol como alternativa al almacenamiento geológico en Alemania [40].

En general, actualmente son muy pocas las contribuciones considerando el marco de modelado, simulación y optimización de una SC CCUS, ya que muy pocas de ellas optimizaron superestructuras CCUS a nivel continental y en particular, la mayoría de ellas considero solo EOR como alternativa al almacenamiento de CO₂, dado que se trata de un proceso conocido y con una gran capacidad para generar beneficios. Sin embargo, aunque existe un gran potencial con EOR, no se reconoce como una solución viable y a gran escala en Europa [41]. Por otro lado, dichos artículos se centran a nivel regional y nacional, y hasta la fecha ninguno aborda el problema de conversión y utilización del CO₂ a escala europea. Esta contribución tiene como objetivo proporcionar una optimización CCUS SC europea a gran escala, con el objetivo principal de abordar el escalón de conversión de CO₂ en productos útiles a través de una etapa de diseño a medida. Con respecto a las posibles opciones de conversión de CO₂, los principales problemas de investigación permanecen abiertos y deben abordarse, como la escalabilidad y los costos, especialmente para la carbonatación mineral y las vías biológicas [42]. Este estudio solo tendrá en cuenta la conversión química como una ruta de utilización potencial, en oposición al mero secuestro geológico en cuencas apropiadas. La herramienta de modelado MILP resultante proporcionará información sobre el diseño óptimo de sistemas CCUS integrales a una escala geográfica notable, para proporcionar a los investigadores, inversores y responsables políticos con un marco metodológico para el análisis cuantitativo y estratégico de una gama de posibles alternativas para una disminución significativa de las emisiones europeas de CO₂.

2. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es la optimización del rendimiento económico, en términos de coste total [€/año], de la instalación de un sistema de captura, transporte, almacenamiento y uso del CO₂, y por tanto proporcionar:

- La ubicación geográfica, la escala y el costo de los lugares de captura de CO₂.
- La selección de la tecnología de captura de CO₂.
- La escala, la ubicación geográfica y los costos de las regiones de secuestro de CO₂.
- La definición y el costo del modo de transporte de CO₂ entre dos nodos geográficos.
- Selección, ubicación, escala y beneficio de los nodos de conversión química.

- La configuración final de la cadena de suministros CCUS de acuerdo con el objetivo europeo de la reducción de emisiones de CO₂.

3. Planteamiento del problema

En el presente trabajo, se propone la optimización económica de la cadena de suministros a nivel europeo de una red de captura, almacenamiento, secuestro y uso del carbono en un horizonte temporal equivalente a un año a través de un modelo matemático MILP. Además, se ha realizado la optimización de una red de CCUS para España, donde a diferencia de Europa se ha diferenciado entre modos de transporte, los resultados se encuentran detallados en la Sec 5.2.

El modelo matemático se divide en cuatro sub-modelos: (i) el modelo de captura, que posibilita la elección dentro del conjunto de tecnologías de captura $k = \{post_{carbon}^{comb}, oxy_{carbon}^{oxy}, pre^{comb}\}$; (ii) el modelo de transporte, que plantea la elección dentro del conjunto $l = \{Oleoducto\ Tierra, Oleoducto\ Mar, Barco\}$; (iii) el modelo de secuestro y (iv) el modelo de utilización de CO₂ como materia prima para la obtención de los productos recogidos en el conjunto $\psi = \{MeOH, PPP\}$.

3.1. Fuentes de emisión

De la base de datos EDGAR (del inglés, *The Emissions Database for Global Atmospheric Research*) se han obtenido las fuentes estacionarias europeas muy grandes ($> 10^6$ toneladas de CO₂/año) para el año 2018, todas ellas plantas productoras de electricidad, las cuales se definen a través del conjunto de fuentes estacionarias de emisiones $g = \{1, 2, \dots, 124\}$ (Figura 4a). Con el fin de representar una discretización geográfica de las fuentes estacionarias de emisiones se creó una cuadrícula que consta de 124 celdas. Las fuentes de emisiones dentro de una misma celda se agruparon y se asumió que estaban ubicadas en el centro de la celda (Figura 4b) [30]. Cada grupo de cuadrícula g representa la emisión total de su área y comprende al menos una fuente de emisión activa. Asumiendo las emisiones europeas de CO₂ constantes desde 2018, la red produce $1.38 \cdot 10^9$ toneladas de CO₂/año, y por lo tanto una media de emisiones por instalación de $3.72 \cdot 10^6$ toneladas de CO₂/año. Con el fin de proporcionar una representación espacial explícita de Europa a partir de la ubicación de las fuentes de emisión se ha calculado la matriz de distancias $LD_{g,g'}$ [km] entre los nodos de origen g y los nodos de destino g' , la metodología de cálculo se encuentra detallada la Sec. 10.2.

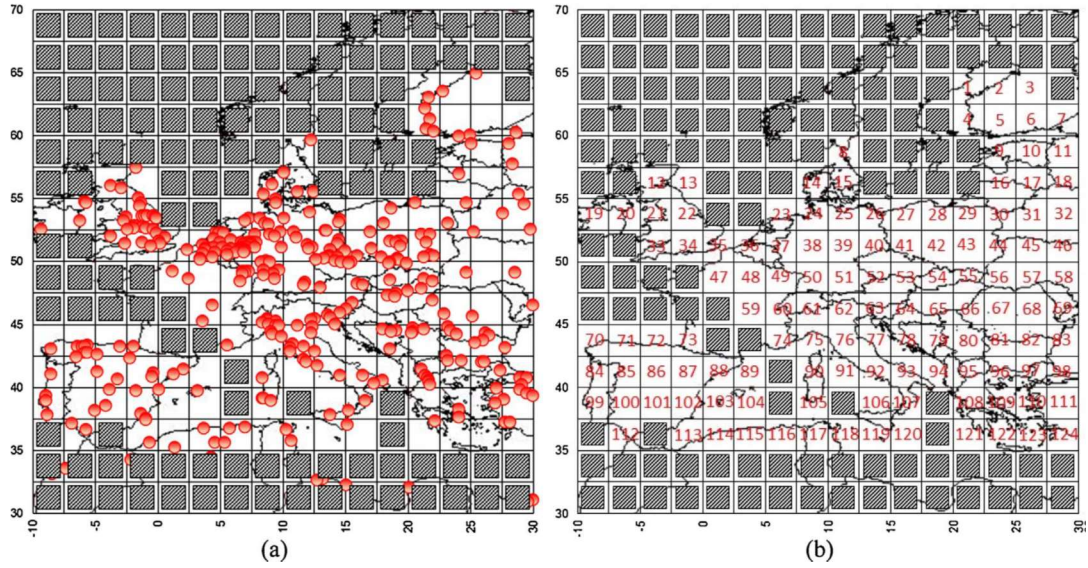


Figura 4. Representación espacial de Europa. Las celdas negras representan regiones sin grandes fuentes de emisiones de CO₂. En este estudio se han considerado fuentes de emisiones con más de 106 tCO₂/año
(a). En la figura (b) se muestran dichas fuentes.

Dado que el combustible (gas o carbón) utilizado por las centrales eléctricas determina la tipología de las tecnologías de captura k , así como la costes de captura, es necesario conocer qué combustibles fósiles se explota en la generación de electricidad. La estrategia que se ha empleado en este trabajo se basa en las cuotas de producción de electricidad por tecnología específicas de cada país europeo. Las emisiones medias son de 1.04 kg de CO₂ por kWh en el caso de la central eléctrica de carbón y de 0.383 kg de CO₂ por kWh en el caso del gas [30]. Por tanto, hemos supuesto que la emisión de CO₂ dentro de una celda se distribuirá en función de las emisiones medias. Esto se ha estimado para todas las celdas introduciendo el parámetro $\gamma_{k,g}$ [%] (Tabla A11), que representa el porcentaje de emisiones dentro de la celda g para la que se podría emplear la tecnología k . El parámetro $\gamma_{k,g}$ [tCO₂^{carbon/gas} / tCO₂^{tot}] se calculó de acuerdo con los porcentajes de 2013 de combustión de carbón y gas para la producción de electricidad para cada país europeo [43]. El supuesto anterior representa una simplificación, ya que hemos supuesto que las cuotas nacionales de uso de combustibles son las mismas en todo el territorio de un país. En realidad, eso no es del todo cierto y pueden surgir algunas diferencias en términos de ubicación de las tecnologías de captura k , del diseño del sistema de transporte de CO₂ y la ubicación de las plantas de conversión de este. Sin embargo, cabe mencionar que esta simplificación se ha llevado a cabo por falta de datos disponibles para realizar un mapeo más detallado de las fuentes de emisión europeas.

3.2. Captura

Hay tres tecnologías principales para capturar CO₂ del uso de combustibles fósiles: postcombustión de carbón/gas, precombustión y oxidación. Debido a que, para cada sistema de producción, diferentes configuraciones tecnológicas son viables económicamente, un aspecto

clave de este trabajo es la definición del conjunto de tecnologías de captura k . Debido a que no existen evidencias de la aplicación de la precombustión en instalaciones de carbón, en el presente trabajo se asume que la captura de CO₂ de precombustión se puede aplicar únicamente a las instalaciones de gas. En resumen, para las plantas alimentadas de carbón, se han considerado las tecnologías de postcombustión y oxidación, mientras que las tecnologías de captura de precombustión y postcombustión gas se han considerado para las plantas alimentadas de gas. El coste unitario de captura de cada una de las tecnologías k (UUC_k [€/tCO₂/año]) y la eficiencia de captura (η_k), se recogen en la Tabla A6.

3.3. Transporte

El CO₂ puede ser transportado en tres estados: gas comprimido, líquido y sólido. El transporte a escala comercial incluye tanques, tuberías (ya sea en la costa o en alta mar) y barcos (largas distancias en alta mar).

Como hemos comentado anteriormente, para la resolución del problema a pequeña escala (España), se ha diferenciado entre los tres modos de transporte, conjunto $l = \{Oleoducto\ Tierra, Oleoducto\ Mar, Barco\}$ (Tabla A4). Mientras que para el caso de Europa se ha fijado un modo de transporte para evitar un tamaño de problema excesivo que implicaría tiempos de resolución inviables, que únicamente serían abordables mediante el uso de algoritmos de descomposición (por ejemplo, Benders y Lagrange), lo cual se ha considerado que se encuentra fuera del alcance de este trabajo (Tabla A3).

El coste unitario de transporte ($UTC_{p,l}$ [€/tCO₂/km]) mediante oleoductos terrestres y marinos depende del caudal transportado de CO₂ [3], que en el presente trabajo se delimita con diferentes intervalos de caudal de CO₂ transportado, Q_p [MtCO₂/año]. A diferencia del transporte por tubería, el coste unitario de transporte por barco es independiente de la cantidad transportada, y se correlaciona linealmente con la distancia, con un valor de la pendiente de la recta de regresión de -0.00001385 [€/tCO₂/km²], y un valor de ordenada en el origen de 0.03215 [€/tCO₂/km] [3] (Tabla A4).

Los costes unitarios disminuyen rápidamente a medida que aumenta el flujo de CO₂ transportado, en cambio el efecto de la distancia de transporte sobre el coste unitario es menos significativo [44]. Cabe destacar que, en este trabajo se han considerado las características geográficas específicas (por ejemplo, presencia de montañas o de una gran ciudad).

3.4. Secuestro

Se han proporcionado datos espacialmente explícitos para el secuestro geológico de carbono con el fin de optimizar la red de diseño para una infraestructura de captura, almacenamiento y uso de CO₂. El Proyecto GeoCapacidad de la UE proporciona un análisis de las formaciones geológicas que pueden atrapar el CO₂ de manera eficiente [45]. Los resultados se basan en una serie de

criterios para seleccionar, y clasificar los sitios de almacenamiento: profundidad del yacimiento para garantizar que el CO₂ se encuentre en fase supercrítica (menos de 800m), la integridad del sello para evitar fugas de CO₂, la capacidad de almacenamiento debe ser suficientemente grande en comparación con las emisiones de las plantas y las características petrofísicas deben garantizar la viabilidad económica y la prevención de fugas [46].

Se considera un potencial del almacenamiento geológico europeo para cada una de las regiones g (Tabla A5). En resumen, la representación espacial explícita de Europa está vinculada con los datos cuantitativos europeos de capacidad de almacenamiento de CO₂. El mayor potencial de almacenamiento que se puede encontrar es España (14 Gtons de CO₂), Alemania (17 Gtons de CO₂) y Reino Unido (14 Gtons de CO₂).

En cuanto al coste de secuestro de CO₂, se describe en la Sec. 4.3, según la metodología propuesta por Ogden [47] para la instalación, operación y mantenimiento de pozos de inyección; teniendo en cuenta que el secuestro de CO₂ en tierra no está permitido en varios países (Países Bajos, Alemania, Austria). El efecto de esta restricción legislativa se analizará en la Sec.5.4.2.

3.5.Utilización

A pesar de la gran cantidad de mecanismos de conversión que existen actualmente para el CO₂ [10,11], en el presente trabajo se han seleccionado la conversión a metanol (MeOH) y polioles de carbonato de poliéter (PPP), debido a que ambos cumplen con los requisitos establecidos (umbral mínimo de producción anual, disponibilidad de datos tecno-económicos, respetuosos con el medio ambiente y económicamente prometedor). La conversión química del CO₂ en PPP genera 2.65 kg CO₂-eq por kg de producto, consiguiendo una reducción del 11% de emisiones de GEI respecto al proceso tradicional. De manera similar ocurre con la conversión del CO₂ en MeOH , reduciendo 1.2 kg de CO₂ por kg de MeOH respecto al proceso tradicional. La conversión del CO₂ en PPP se caracteriza por generar elevados beneficios, mientras la del MeOH destaca más por la reducción de emisiones al medio ambiente. Los PPP son productos químicos generalmente empleados en la producción de poliuretanos y son uno de los polímeros más producidos, con una producción mundial anual de 9.4 Mt, de las que 2.4 Mt se producen en Europa [48], mientras que el MeOH es uno de los productos químicos más versátiles y producidos, con una capacidad de producción mundial de 125 [Mt/año] y una demanda europea de 12 [Mt/año] [49]. Se ha asumido como precio de venta de ambos productos químicos, el precio de venta actual 4150 [€/t] para el PPP y 410 [€/t] para el MeOH [5]. Como caudales de salida del proceso de conversión del CO₂ se han considerado los valores recogidos en la Fig.5. El modelo de utilización se encuentra detallado en el Sec. 4.4.

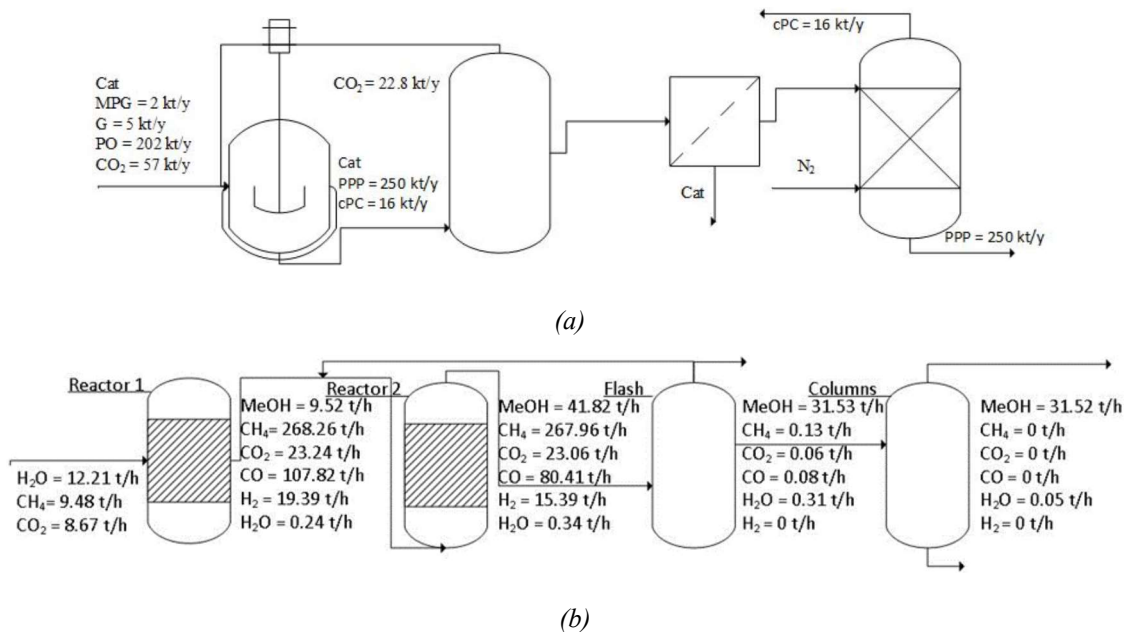
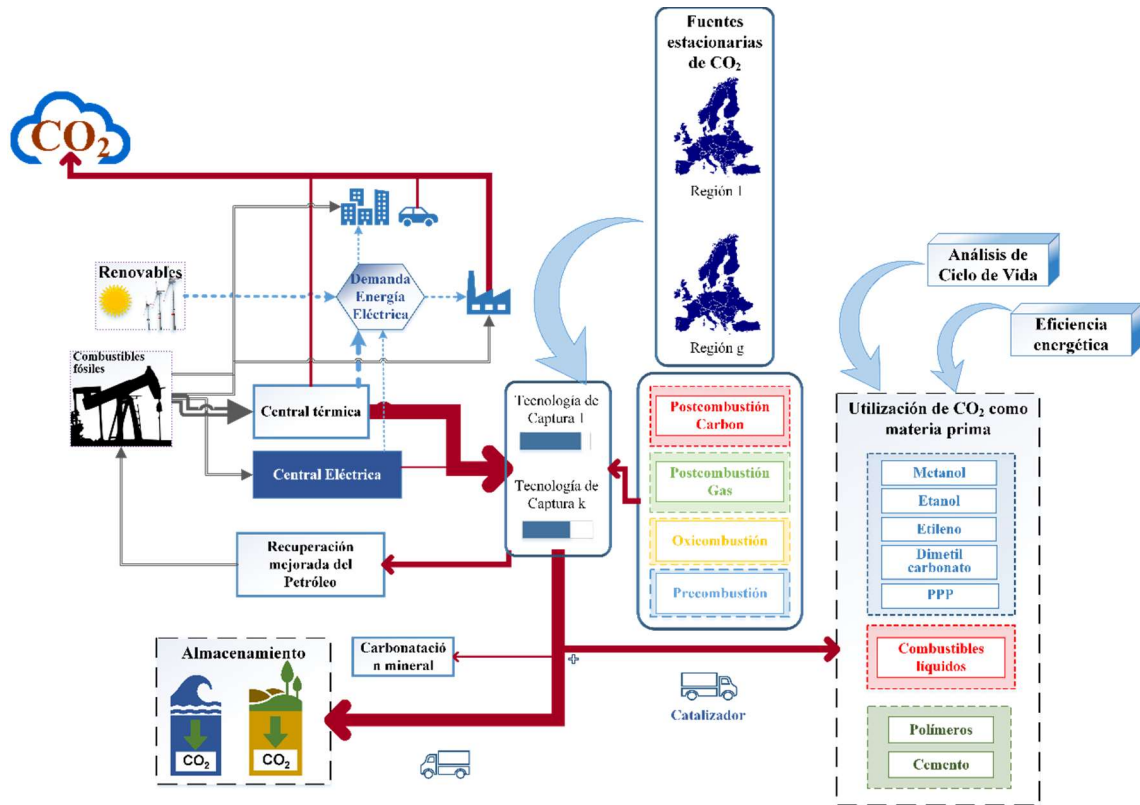


Figura 5. Caudales principales y esquemas de conversión de (a) PPP [52] y (b) MeOH [54].



4. Descripción del modelo

Como hemos comentado anteriormente se plantea la resolución de un problema MILP mediante el uso de GAMS utilizando el solucionador CPLEX. El marco de modelización incluye la captura, el transporte, el secuestro y la utilización de CO₂.

$$\begin{cases} \text{Objetivo} = \min(CT) \\ CT = CTC + CTT + CTS - \text{Beneficio} \\ \text{s. a:} \\ \text{Modelo del problema de captura} \\ \text{Modelo del problema de transporte} \\ \text{Modelo del problema de secuestración} \\ \text{Modelo del problema de utilización} \end{cases} \quad (1)$$

En particular, la función objetivo, pretende minimizar el coste total (1), el cual viene dado por la suma de los costes generales de instalación y operación derivados de la captura [€/t/año], las etapas de transporte [€/t/año], secuestro [€/t/año] del CO₂ y el beneficio [€/t/año] gracias a la etapa de conversión del CO₂ en productos químicos, sin tener en cuenta el coste de producción de PPP y MeOH.

4.1. Modelo de captura

La representación espacial de Europa se describe a través del set g que representa todas las regiones de captura que constituyen la malla de discretización. Para cada una de las regiones g se puede seleccionar e instalar una posible tecnología de captura k . En cada una de las regiones g podemos definir el parámetro P_g^{max} [tCO₂/año] que representa las emisiones anuales globales de CO₂. En general, el CO₂ procesado a través de todas las tecnologías k en la región g , $P_{k,g}$ [tCO₂/año], debe ser igual o inferior a las emisiones máximas de la región g , P_g^{max} [tCO₂/año].

$$\sum_k P_{k,g} \leq P_g^{max} \quad \forall g \quad (2)$$

Además, P_g^{max} representa el límite superior para el cálculo de $P_{k,g}$. El flujo de CO₂ capturado a través de cada una de las tecnologías k en la región g está también limitado mediante el parámetro $\gamma_{k,g}$ [%], que como hemos comentado en el apartado anterior, representa el porcentaje de emisiones que se puede procesar a través de cada una de las tecnologías k en la región g según las características espaciales de los países europeos en cuanto a la generación de energía a base de carbón y gas.

$$P_{k,g} \leq P_g^{max} \cdot \gamma_{k,g} \quad \forall k, g \quad (3)$$

Seleccionada una de las tecnología de captura k en la región g , se establece un límite inferior para $P_{k,g}$ [tCO₂/año]:

$$\sum_{k,g} P_{k,g} \geq \alpha \cdot \sum_g P_g^{max} \quad (4)$$

donde α representa el límite mínimo europeo de emisiones de CO₂ para su captura y secuestración. De manera que se define una cantidad mínima global a capturar y secuestrar de CO₂ permitiendo

al modelo elegir donde instalar los nodos de captura. Se establece un objetivo global mínimo de reducción de carbono en Europa teniendo en cuenta las grandes fuentes estacionarias indicadas en el presente trabajo (Figura 4a). Por lo que, el caudal de CO₂ capturado mediante la tecnología k en la región g , $C_{k,g}$ [tCO₂/año], se calcula de la siguiente manera:

$$C_{k,g} = \eta_k \cdot P_{k,g} \quad \forall k, g \quad (5)$$

η_k hace referencia al valor medio de la eficiencia de captura de cada una de las tecnologías k (Tabla A6). El coste total de captura (CTC [€/año]) en la región g viene dado por la siguiente expresión:

$$CTC = \sum_{k,g} (UCC_k \cdot C_{k,g}) \quad (6)$$

donde UCC_k [€/tCO₂] es el coste unitario de captura a través de la tecnología k (Tabla A6).

4.2. Modelo de transporte

Los costes de instalación y explotación de las infraestructuras de transporte pueden calcularse a través del parámetro, $UTC_{p,l}$ [€/tCO₂/km]. El balance de conservación de CO₂ en la región g se (8) define cómo el sumatorio del flujo de captura de CO₂ ($C_{k,g}$) más el flujo transportado desde la región g' (región de destino) a la región g (región de origen) a través del modelo de transporte l , ($Q_{g',l,g}$). Dicho sumatorio debe ser igual a los flujos de salida, que vienen dados por el flujo de CO₂ secuestrado en la región g , U_g^{Seq} , más la cantidad enviada de CO₂ desde la región g hasta la región g' a través del modelo de transporte l ($Q_{g,l,g'}$), más la cantidad enviada al proceso de conversión de productos químicos en la región g , $U_{\Psi,g}$ [tCO₂/año].

$$\sum_k C_{k,g} + \sum_{l,g'} Q_{g',l,g} = \sum_{l,g'} Q_{g,l,g'} + U_g^{Seq} + \sum_{\Psi} U_{\Psi,g} \quad \forall g \neq g' \quad (8)$$

A continuación, se establecen los rangos de caudales para diferenciar entre distintos costes de transporte unitario en función de las cantidades de CO₂ transportado.

$$Q_{p,g,l,g'} = y_{p,g,l,g'}^{Trans} \cdot Q_p \quad \forall g, l, g' \quad (9)$$

$$Q_{g,l,g'} = \sum_p Q_{p,g,l,g'} \quad \forall g, l, g' \quad (10)$$

Por lo tanto, el tamaño y la selección de transporte se opera a través de la variable de decisión binaria $y_{p,g,l,g'}^{Trans}$, que representa el posible envío de una cantidad $Q_{p,g,l,g'}$ desde g hasta g' a través del modo de transporte l . Seguidamente, se impone que el transporte a través de cada uno de los modos de transporte l sea factible entre g y g' , y que deben evitarse los bucles de transporte internos (por ejemplo, no debe producirse un flujo desde la región g a la propia región g), cabe

destacar que siempre la región g (región de origen) y la región g' (región de destino) son diferentes.

$$Q_{g,l,g} = 0 \quad \forall g, l \quad (11)$$

El coste total de transporte, CTT [€/año], viene dado por la contribución del coste de transporte: por oleoductos (por tierra y por mar), CTT^{Size} [€/año]), que tiene en cuenta el factor de escala debido a la capacidad transportada; por barco (CTT^{Dist} [€/año]), que tiene en cuenta el factor de escala sobre la distancia recorrida; y de corta distancia que tienen lugar dentro de cada región g (CTT^{Intra} [€/año]):

$$CTT = CTT^{Size} + CTT^{Dist} + CTT^{Intra} \quad (12)$$

En la ecuación anterior, CTT^{Size} se calcula mediante la siguiente expresión:

$$CTT^{Size} = \sum_{p,g,l,g'} (UTC_{p,l} \cdot Q_{p,g,l,g'} \cdot LD_{g,g'} \cdot \tau_g) \quad (13)$$

Así, el CTT^{Size} depende del caudal transportado (el factor de escala lo recoge el parámetro, $UTC_{p,l}$) y de la distancia lineal entre las regiones g y g' , que se corrige mediante un factor de tortuosidad τ_g el cual representa un parámetro corrector del terreno en la región g teniendo en cuenta las características geográficas específicas. Este factor corrector se calcula siguiendo la analogía propuesta por la IEA (del inglés, *International Energy Agency*) entre el transporte por gasoducto de CO₂ y la transmisión eléctrica [50]. Por tanto, se introduce un factor de coste multiplicativo que oscila entre un mínimo de 1.00 en aquellas zonas donde predomine los paisajes llanos (por ejemplo, praderas) y máximo de 1.50 en regiones muy montañosas, en las cuales se puede determinar la necesidad de una trayectoria de la tubería diferente, normalmente más tortuosa (Tabla A2).

Por otro lado, CTT^{Dist} representa la contribución a los costes de transporte entre todas las regiones por barco:

$$CTT^{Dist} = \sum f^{ship} \cdot \sum_{g,g'} (Q_{g,l,g'} \cdot LD_{g,g'}) \quad \forall l = barco \quad (14)$$

Donde el término f^{ship} hace referencia al coste unitario para el transporte por barco [€/tCO₂/km/año]. Por último, el tercer término de la ecuación (12) representa todos los costes de transporte de corta distancia dentro de cada región de captura g :

$$CTT^{Intra} = \overline{UTC} \cdot \sum_{k,g} (C_{k,g} \cdot LD_g) \quad (15)$$

Donde \overline{UTC} se ha calculado sacando el valor medio del coste unitario de transporte por oleoducto terrestre a partir de los valores discretizados recogidos en el artículo de d'Amore 2020 [32], tomando un valor de 0.0125 [€/tCO₂/km/año]. Mientras que LD_g [km] representa el tamaño de cada una de las celdas para cada región g , suponiendo que las fuentes de emisión se agrupan en el centro de la celda se considera que la longitud de intra-conexión es igual a $\sqrt{2}/2$ veces el tamaño de la celda LD_g de manera que nos aseguramos de que las tuberías puedan llegar a todas las zonas marginales de la celda para el correcto almacenamiento de CO₂.

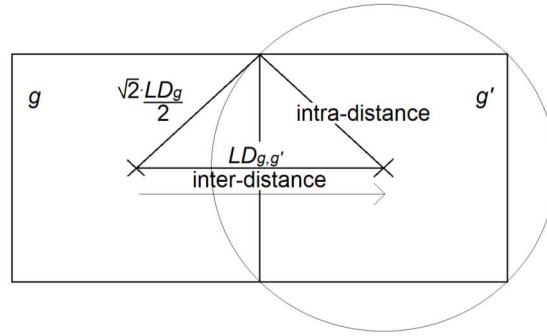


Figura 7. Definición de inter-conexión entre la región g y g' y de intra-conexión, de acuerdo con la inter-distancia entre la región g y g' y la máxima intra-distancia, respectivamente.

4.3. Modelo de secuestro

Una vez el CO₂ es transportado, puede ser secuestrado en las formaciones geológicas en función de los flujos de secuestro U_g^{Seq} [tCO₂/año]. Se impone un límite superior para la cantidad total que se puede almacenar en cada región g :

$$U_g^{Seq} \leq U_g^{SeqMax} \quad \forall g \quad (16)$$

Donde U_g^{SeqMax} [tCO₂/año] representa el límite superior para el almacenamiento en la región g , estos valores se recogen en la Tabla A5. El número de pozos de secuestro N_g se puede definir para cada una de las regiones g comparando el CO₂ realmente secuestrado (U_g^{Seq}) con la capacidad máxima de CO₂ [t/año] que puede ser procesado por un único pozo, N_{max} [tCO₂/año], que dado el desconocimiento de las propiedades geológicas específicas de los pozos como por ejemplo la permeabilidad, se ha asumido un valor medio de inyección de 1.56 MtCO₂/año por pozo [47]:

$$N_g = \frac{U_g^{Seq}}{N_{max}} \quad \forall g \quad (17)$$

En cuanto al coste de secuestro total es proporcional al número de pozos de inyección N_g que deben instalarse en la región g :

$$CTS = \sum_g [(CCR^{Seq} \cdot OM^{Seq}) \cdot off_g \cdot (m_1 \cdot d_g + m_2) \cdot N_g] \quad (18)$$

donde, CCR^{Seq} [%] y OM^{Seq} [%] representan las tasas anuales de coste de capital y de mantenimiento, repectivamente; m_1 y m_2 fijados en 1.6 M€/km/año y 1.3 M€/km/año respectivamente son los parámetros de coste para la construcción de pozos y posterior inyección de CO₂, mientras que d_g [km] es la profundidad de inyección en cada una de las regiones g , que oscila entre un valor mínimo de 0.8 km y un máximo de 2 km, para el presente trabajo se ha tomado un valor medio de 1.4 km. Además, off_g representa el coste adicional de instalación y mantenimiento de pozos de inyección en alta mar en lugar de en la tierra, este valor se fijó en un valor de 5 [51].

4.4. Modelo de utilización

Explicados los modelos de captura, transporte y secuestro en el siguiente apartado hablaremos sobre el modelo de utilización, el cual se basa en el proceso de conversión para la producción de PPP o MeOH. El beneficio total obtenido a partir de la conversión de CO₂ se calcula de acuerdo con el flujo de caja $CF_{\Psi,g}$ [€/año] generado por la producción y venta de los productos químicos Ψ en la región g :

$$Beneficio = \sum_{\Psi,g} CF_{\Psi,g} \quad (19)$$

Donde $CF_{\Psi,g}$ se define como:

$$CF_{\Psi,g} = (R_{\Psi,g} - COM_{\Psi,g}) \cdot (1 - tax_g) - d_{\Psi,g} \cdot tax_g \quad \forall \Psi, g \quad (20)$$

$COM_{\Psi,g}$ [€/año] representa el coste de producción de los productos químicos Ψ en la región g . En cuanto a tax_g [%] (Tabla A7) es la tasa de impuesto corporativo en cada una de las regiones, mientras que $d_{\Psi,g}$ [€/año] es la depreciación del sistema de producción para el producto químico Ψ en la región g . $R_{\Psi,g}$ [€/año] hace referencia a los ingresos debido a la venta tanto de ambos productos químicos Ψ como de aquellos que puedan derivar de ellos en la región g , estos se calculan como:

$$R_{\Psi,g} = Rb_{\Psi,g} \cdot U_{\Psi,g}^{chem} \quad \forall \Psi, g \quad (21)$$

donde, $U_{\Psi,g,t}^{chem}$ [t/año] es la cantidad de producto químico Ψ que se produce en la región g , mientras que $Rb_{\Psi,g}$ [€/t/año] representa los ingresos unitarios por la venta del producto químico Ψ en la región g , los cuales se han calculado a partir del precio unitario de venta de los productos químicos δ generados en el proceso de conversión, $P_{\delta,\Psi}$ [€/t/año] y de los caudales másicos de salida de los productos químicos Ψ , $m_{\delta,\Psi}^{output}$ [t/año] (Fig. 5):

$$Rb_{\Psi,g} = \sum_{\delta} \frac{P_{\delta,g} \cdot m_{\delta,\Psi}^{out}}{U_{\Psi}^{ref}} \quad \forall \Psi, g \quad (22)$$

El parámetro U_{Ψ}^{ref} , representan la capacidad de referencia de producción de una planta, tomando el valor de 250 kt/año [32]. El caudal de salida $m_{\delta,\Psi}^{output}$ y el precio unitario $P_{\delta,\Psi}$ son datos extraídos de [52], [53] y [54], los cuales se diferencian entre los distintos países europeos c en función del coste del gas natural, electricidad y coste de mano de obra (Tabla A7).

El coste de fabricación $COM_{\Psi,g}$ se calcula de acuerdo con la formulación propuesta por Turton [55]:

$$COM_{\Psi,g} = U_{\Psi,g}^{chem} \cdot [A_{\Psi} \cdot (Raw_{\Psi,g} + util_{\Psi,g})] + B_{\Psi} \cdot FCI_{\Psi,g} + C_{\Psi} + lab_{\Psi,g} \cdot \gamma_{\Psi,g}^{chem} \quad \forall \Psi, g \quad (23)$$

cómo podemos ver en la ecuación (24), el coste de fabricación depende de la cantidad de producto químico en la región g , $U_{\Psi,g}^{chem}$ [tCO₂/año] que se multiplica por el escalar A_{Ψ} el cual toma el valor de 1.23 que pondera a su vez la suma de la materia prima $Raw_{\Psi,g}$ [€/tCO₂/año] (Tabla A8) y $util_{\Psi,g}$ [€/tCO₂/año] (Tabla A9), que representan los coste unitarios de las materias primas y de los servicios para el producto químico Ψ en la región g , respectivamente. Además, la variable $COM_{\Psi,g}$ también depende de la inversión en capital fijo $FCI_{\Psi,g}$ [€/año] para la producción de dichos productos químicos en la región g , ponderada por el escalar B_{Ψ} que es igual a 0.28; y del coste de la mano de obra $lab_{\Psi,g}$ [€/t/año] pondera en su caso por el escalar C_{Ψ} que en su caso toma el valor de 2.73 y se supone que escala linealmente con el tamaño de la planta. La variable binaria $\gamma_{\Psi,g}^{chem}$ determina si el flujo másico $U_{\Psi,g}^{chem}$ del producto químico en la región g toma el valor 0 o no, y en el caso de que no tome el valor nulo los costes de la mano de obra $lab_{\Psi,g}$ contribuirán al valor final del coste de producción del producto químico Ψ en la región g . Si se fabrica el producto químico Ψ en la región g , se establece un límite superior $U_{\Psi,g}^{max}$ establecido de 2.4 Mt/año para el PPP y 12 Mt/año para el MeOH (valores actuales de producción en Europa).

$$U_{\Psi,g}^{chem} \leq \gamma_{\Psi,g}^{chem} \cdot U_{\Psi,g}^{max} \quad \forall \Psi, g \quad (24)$$

En este modelo se asume que la producción de PPP y MeOH no puede ser superior a la actual demanda europea, por lo tanto:

$$\sum_g U_{PPP,g}^{chem} \leq DEMANDA_{PPP} \quad (25)$$

$$\sum_g U_{MeOH,g}^{chem} \leq DEMANDA_{MeOH} \quad (26)$$

En cuanto al término $FCl_{\Psi,g}$ de la ecuación (24) se ha evaluado siguiendo la siguiente expresión:

$$FCl_{\Psi,g} = U_{\Psi,g}^{chem} \cdot FCl_{\Psi}^{Slope} \cdot y_{\Psi,g}^{chem} \cdot FCl_{\Psi}^{Intercept} \quad \forall \Psi, g \quad (27)$$

donde FCl_{Ψ}^{Slope} [€/tΨ] y $FCl_{\Psi}^{Intercept}$ (Tabla A13) son respectivamente, los coeficientes para calcular los términos variable y fijo de la inversión de capital necesaria para obtener cada producto químico Ψ [57].

Una vez definido $FCl_{\Psi,g}$ (27), es posible evaluar la depreciación $d_{\Psi,g}$ [%], porcentaje fijado al 10% [58], sobre el coste fijo de capital de inversión para la producción de productos químicos Ψ en la región g:

$$d_{\Psi,g} = 0.1 \cdot FCl_{\Psi,g} \quad \forall \Psi, g \quad (28)$$

Como hemos visto anteriormente, $U_{\Psi,g}^{chem}$ representa la cantidad óptima de producto químico Ψ que puede producirse en la región g según la solución del modelo. Es posible vincular dicha producción con la cantidad total de CO₂ enviado al proceso de conversión, $U_{\Psi,g}$ [tCO₂/año]. En primer lugar, definimos la variable $U_{\Psi,g}^{conv}$ [tCO₂/año], la cual representa de la cantidad total de CO₂ enviada al proceso de conversión, aquella que se ha convertido para obtener el producto químico Ψ en la región g, y que se determina a partir de la cantidad de producto químico Ψ obtenido:

$$U_{\Psi,g}^{conv} = \eta_{\Psi}^R \cdot U_{\Psi,g}^{chem} \quad \forall \Psi, g \quad (29)$$

El parámetro η_{Ψ}^R [tCO₂ / t Ψ/año] representa la cantidad de CO₂ que se necesita para producir una cantidad unitaria de producto químico Ψ. Por otro lado, tenemos la variable U_g^{Direct} [tCO₂/año] que tiene en cuenta las emisiones directas de CO₂ generadas durante el proceso de fabricación de los productos químicos Ψ en la región g, calculada de acuerdo a la siguiente expresión:

$$U_{\Psi,g}^{Direct} = (1 - \eta_{\Psi}^C) \cdot U_{\Psi,g} \quad \forall \Psi, g \quad (30)$$

en este caso el parámetro η_{Ψ}^C ([tCO₂ capturado / tCO₂ que entran el proceso]) hace referencia a la eficiencia de conversión de CO₂ del proceso que genera el producto químico Ψ [59]; y la variable $U_{\Psi,g}$ [tCO₂/año] se define como la cantidad total de CO₂ enviada para la obtención del producto químico Ψ, en la región g, y que se puede expresar como la suma de:

$$U_{\Psi,g} = U_{\Psi,g}^{conv} + U_{\Psi,g}^{Direct} \quad \forall \Psi, g \quad (31)$$

También es posible evaluar las emisiones indirectas de CO₂ procedentes del proceso de conversión a través de la variable U_g^{Ind} [tCO₂/año], dichas emisiones indirectas se calculan siguiendo la siguiente expresión:

$$U_g^{Ind} = \sum_{\Psi} CI_g \cdot EEC_{\Psi} \cdot U_{\Psi,g}^{Conv} \quad \forall g \quad (32)$$

Donde CI_g [tCO₂^{Indirecto}/GJ] es la intensidad de emisión de carbono para generación de electricidad en la región g [60] mientras que EEC_{Ψ} [GJ/tCO₂] es el consumo específico de energía eléctrica para producir el producto químico Ψ [52]. En caso de explotar sólo una de las fuentes de energía de bajo contenido en carbono (por ejemplo, las energías renovables o la energía nuclear) se supondrá que CI_g es igual a 0, por lo que la contribución de las emisiones indirectas de CO₂ generadas por los procesos de conversión se desprecia por completo.

Por último, la cantidad total de CO₂ transformada para la obtención de todos los productos químicos debe ser mayor o igual que la cantidad de CO₂ generada de forma directa e indirecta durante el proceso de fabricación de dichos productos químicos:

$$\sum_{\Psi,g} U_{\Psi,g}^{Conv} \geq \sum_{\Psi,g} U_g^{Direct} + \sum_{\Psi,g} U_g^{Ind} \quad (33)$$

5. Resultados

5.1. Diferencias respecto a los artículos d'Amore 2017 y d'Amore 2020.

En el artículo d'Amore 2017 [30], se lleva a cabo la optimización de una cadena de suministros para una red de captura y almacenamiento de CO₂ (CCS) a través de un problema MILP, sin incluir la etapa de utilización de este. En él, se diferencia entre modos de transporte (oleoducto tierra, oleoducto mar y barco), además de realizar un análisis sobre la influencia del límite mínimo europeo (α) de captura de CO₂ en la configuración final de la red como en el coste total de instalación. En cambio, en el artículo publicado en 2020 [32], se realizó la optimización de una configuración de una CCUS, sin diferenciar entre modos de transporte, donde diferentes escenarios (Sec. 5.4.) han sido estudiados con detalle. En el presente trabajo se ha llevado a cabo la fusión de ambos artículos anteriormente mencionados, por lo que a continuación vamos a comentar los cambios/suposiciones realizadas en el modelo matemático utilizado para la optimización de la red CCUS incluyendo modos de transporte, análisis de los Escenarios (A-C) y un estudio sobre la influencia de α (Escenario E-H) tanto en el diseño final de la red como en el coste total [€] para llevar a cabo la puesta en marcha de un sistema de captura, transporte, almacenamiento y utilización del carbón.

En el modelo de captura, se incluyó la ecuación (4), la cual hace referencia al límite inferior del caudal de CO₂ que debe ser procesado por la tecnología k en la región de captura g , $P_{k,g}$ [tCO₂/año]. Este límite debe ser igual o mayor que la cantidad mínima de CO₂ que la Unión Europea obliga a

capturar. Otro de los cambios realizados, es que, en el modelo optimizado en el presente trabajo se ha considerado que el caudal transportado, Q_p [MtCO₂/año] es una variable continua, cuyo límite superior son 30 Mt de CO₂ y su límite inferior 1 Mt de CO₂. En cambio, d'Amore (2020) [32] define Q_p [MtCO₂] como una variable discreta. Por lo que, en nuestro modelo, para el caso de Europa hemos definido dos intervalos de caudales de CO₂, conjunto $p = \{1,2\}$ (Tabla A3).

	p=1	p=2	
	UTC ₁ [€/tCO ₂]	UTC ₂ [€/tCO ₂]	
1 Mt CO ₂			30 Mt CO ₂
	15 Mt CO ₂		

Hemos calculado el coste unitario de transporte, $UTC_{p,l}$ [€/tCO₂/km/año] para cada uno de estos intervalos a partir de los valores discretizados recopilados del artículo d'Amore 2020 [32]. La metodología de cálculo se encuentra detallada en la Sec. 10.3. de los apéndices.

En lo que respecta al modelo de secuestro, el cálculo de los costes totales de secuestro se llevó a cabo mediante la ecuación (19), que a diferencia de la utilizada en d'Amore 2020 [32], dicha ecuación tiene en cuenta tanto la tasa anual de mantenimiento y explotación del pozo de inyección, CCR^{Seq} [%], como el coste construcción (m_1) y posterior inyección (m_2).

El último cambio realizado, fue el cálculo el flujo de caja activo [€/año], ecuación (21), debido a una posible errata en la ecuación (3) del artículo d'Amore 2020 [32], donde el término de depreciación tiene signo positivo, lo cual consideramos que carece de sentido debido a que la depreciación hace referencia a la pérdida de valor de los productos químicos, por lo que el término de depreciación debe ser negativo. En consecuencia, en el presente trabajo se ha calculado el flujo de caja activo [€/año] a partir de la ecuación (20) del artículo de R.Ruiz-Femenía [61].

5.2.Optimización red de suministros CCUS para España, utilizando 3 modos de transporte.

El modelo CCUS estático en el tiempo (i.e., todos los periodos de tiempo se comportan de igual manera y por tanto no es necesario un modelo multiperiodo) fue optimizado mediante el solucionador GAMS CPLEX para un problema MILP. En este apartado analizaremos los resultados obtenidos para la configuración de una red de captura, transporte, almacenamiento y utilización del CO₂ para España (Figura 6). Para ello hemos supuesto, que en España se produce un 10% de demanda actual europea de cada uno de los productos químicos ψ , se ha establecido un valor del límite mínimo europeo de captura de carbono (α) igual al 50% [62]. Además, a diferencia del modelo a gran escala, ha sido posible la resolución del problema diferenciando entre modos de transporte (oleoducto tierra, oleoducto mar y barco) y considerando cuatro intervalos de caudal transportado de CO₂, Q_p [tCO₂/año]. Además, para la representación gráfica

de las configuraciones finales de la CCUS se ha escalado el tamaño de las regiones de captura, secuestro y utilización del CO₂ de manera proporcional a la cantidad de emisiones procesadas en cada una de las regiones.

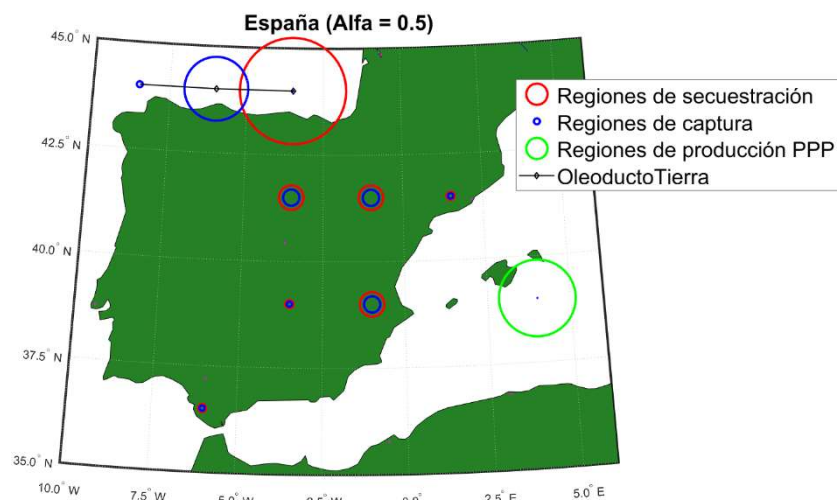


Figura 8. Configuración final de la red CCUS para $\alpha=0.5$.

Como podemos observar para un valor de $\alpha=0.5$, se obtiene una configuración de CS poco compleja, donde de las 39.08 Mt/año de CO₂ capturadas, 39Mt (es decir, el 99.78%) son almacenadas en estructuras geológicas. España se caracteriza por las pocas regiones de secuestro que se encuentran disponibles actualmente. Además, podemos apreciar la diferencia de tamaño que existe entre las regiones de almacenamiento entre el norte y el sur de España. Cabe destacar que el único modo de transporte seleccionado por el modelo para dicho valor de α es el oleoducto tierra, dado que se trata del modo de transporte más económico cuando se transportan grandes cantidades de CO₂. En relación con la utilización del CO₂, sólo el 0.21% de la emisiones totales procesadas son empleadas para la producción de PPP. La producción de dicho producto químico se caracteriza por el bajo coste de los servicios de producción (Tabla A9), a pesar de que el coste de la materia prima para la producción de PPP es mucho más elevado que para el MeOH (Tabla A8).

Para la configuración final de la CS para un valor de $\alpha=0.5$, el coste total de instalación es igual a 10.97 €/t, siendo la mayor contribución el coste total de captura, CTC [€/t/año], el cual representa el 92.84%; en cuanto, al coste total de transporte, CTT [€/t/año], tiene una baja contribución sobre el coste total (6.13%), siendo el coste total de secuestro, prácticamente despreciable (1.03%). La utilización del CO₂ no solo tiene beneficios para el medio ambiente, sino que también reduce el coste de la inversión inicial necesaria para la puesta en marcha de un sistema de CCUS, en un 33.55%.

5.3. Influencia del límite mínimo de captura de CO₂ impuesto por la UE (α).

En este apartado se va a realizar un estudio sobre la influencia del límite mínimo de captura de emisiones de CO₂ (α) establecido por la UE sobre el coste total y la configuración óptima final de la red CCUS. Para ello, hemos analizado cuatro valores de $\alpha = \{0.05, 0.2, 0.5, 0.8\}$.

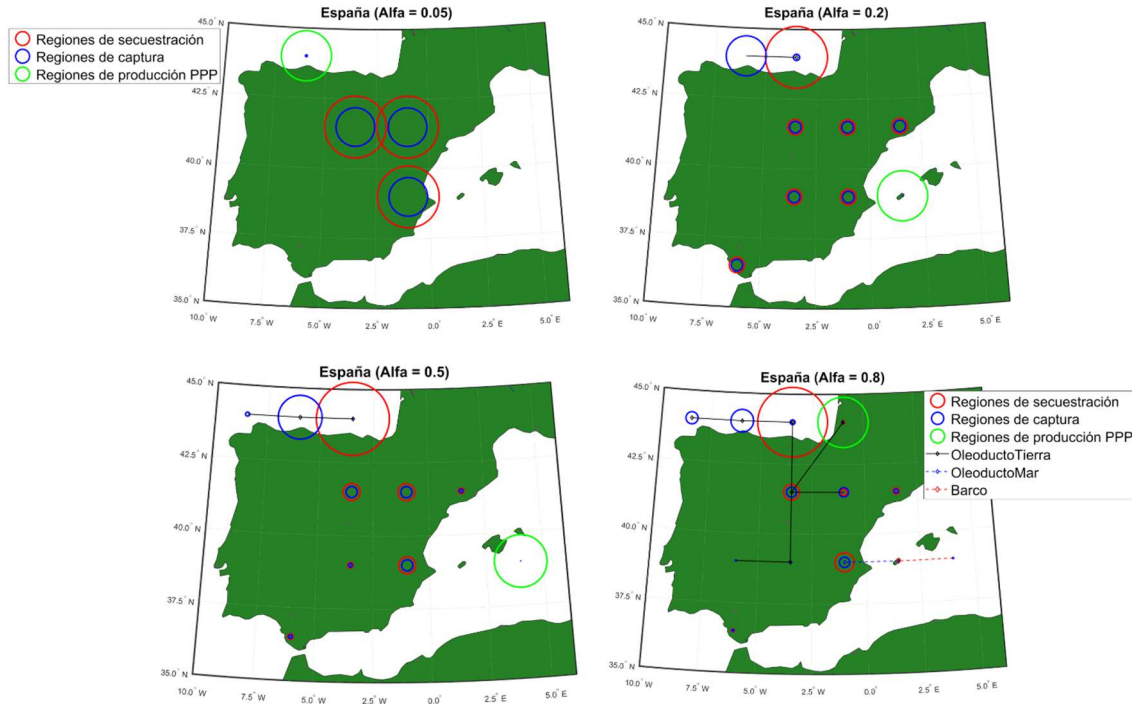


Figura 9. Configuración final de la CS CCUS para $\alpha=0.05, 0.2, 0.5$ y 0.8 .

La Fig. 9, muestra las configuraciones finales de CS CCUS para valores de los diferentes valores de α estudiados. Se puede observar que la complejidad de la red aumenta a medida que el valor de α aumenta, dado que esto implica que mayores caudales de CO₂ deben capturarse, transportarse y almacenarse pasando de 5.5 Mt/año para $\alpha = 0.05$ a 69 Mt/año para $\alpha=0.8$. Cabe destacar que a valores bajos de α , la captura de CO₂ se opera en regiones con almacenamientos geológicos disponibles para su almacenamiento, ya que no existe transporte entre regiones. A medida que la captura de CO₂ aumenta se hace necesario el transporte para equilibrar el almacenamiento. Para valores bajos de α , el único modo de transporte seleccionado por el modelo es oleoducto tierra, ya que, como hemos comentado anteriormente, para optimizar costes, interesa transportar grandes cantidades de CO₂ entre regiones. En cambio, si establecemos que el 80% de las emisiones totales de CO₂ deben ser capturadas, la configuración final de la CS (Figura 9), el modelo selecciona los tres modos de transporte, donde el 94.89% del CO₂ transportado se lleva a cabo a través de oleoductos terrestres, el 3.22% por oleoducto mar y el 1.89% por barco. En general, en la mayoría de las regiones g, se pueden secuestrar más CO₂ que capturar, lo que demuestra el potencial cuantitativo de la instalación de las tecnologías CCUS.

Tabla 2: Caudales de CO₂ procesado para cada valor de α .

α	Demanda	U_g^{Seq}	$U_{\Psi,g}^{conv}$	U_g^{Direct}	U_g^{Ind}
		[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]
0.05	1x	4.68	0.084	0.029	0.0015
0.2	1x	15.60	0.084	0.029	0.0015
0.5	1x	39.00	0.084	0.029	0.0015
0.8	1x	60.84	0.084	0.029	0.0015

Todos los escenarios apuntan a alcanzar un objetivo europeo de reducción de carbono $\alpha=0.5$. Los valores en términos [Mt/año] han sido calculados dividiendo los valores obtenidos en la simulación entre el sumatorio del caudal de CO₂ secuestrado más el convertido como en [32].

Respecto a la etapa de utilización del CO₂ podemos observar el mismo comportamiento anteriormente detallado, como podemos ver en la Tabla 2, el caudal de CO₂ destinado a la conversión de PPP es la misma para cada valor de α , debido a que en todos los casos estudiados la demanda de productos químicos es la misma.

En general, los resultados económicos están determinados por los costes de captura (Tabla 3), que representan hasta un 94.66% ($\alpha=0.05$) de la inversión total, mientras que los costes de transporte y secuestro son muy bajos respecto al CTC [€/t]. Como cabría esperar a mayor coste total (mayor α), menor beneficio se obtiene al instalar un sistema de CCUS. Para el cálculo de los resultados de las Tabla 3, 4, 5, 6, 7 se ha dividido la variable analizada entre la cantidad de secuestro U_g^{Seq} y la cantidad convertida $U_{\Psi,g}^{conv}$ de CO₂ [32].

Tabla 3: Costes de la configuración final de la CS para España para los diferentes valores de α

α	Demanda	CT	CTC	CTT	CTS	Beneficio
		[€/t]	[€/t]	[€/t]	[€/t]	[€/t]
0.05	1x	-32.57	12.65	0.55	0.17	45.94
0.2	1x	0.69	13.25	1.11	0.17	13.84
0.5	1x	10.97	15.33	1.01	0.17	5.54
0.8	1x	15.95	17.58	1.75	0.17	3.55

En relación con la selección de las tecnologías de captura (Figura 10), la opción menos elegida por el modelo es la postcombustión gas, sólo elegida para $\alpha=0.8$, mientras que postcombustión carbón, precombustión y oxidación se instalan en todos los escenarios. Como podemos observar, a medida que aumenta el valor del parámetro α , la cantidad de CO₂ procesado a través de la tecnología de postcombustión de carbón aumenta respecto a la tecnología de precombustión, que inicialmente (es decir, a valores bajos de α) es mayoritaria debido a que es más económica,

aunque sólo se puede aplicar a centrales eléctricas alimentadas con gas natural. Para un valor de $\alpha=0.5$, el 39.02% de las emisiones CO₂ capturadas son procesadas a través de la precombustión, un 24.72% son procesadas a través de la oxcombustión y el 36.25% son procesadas por postcombustión gas, predominado las tecnologías alimentadas por carbón. Para valores bajos de α (0.05) la tecnología de captura mayoritaria es la precombustión, a medida que se aumenta este parámetro va aumentando las regiones de captura, por lo que van apareciendo nuevas tecnologías tal y como se muestra en la Figura 10.

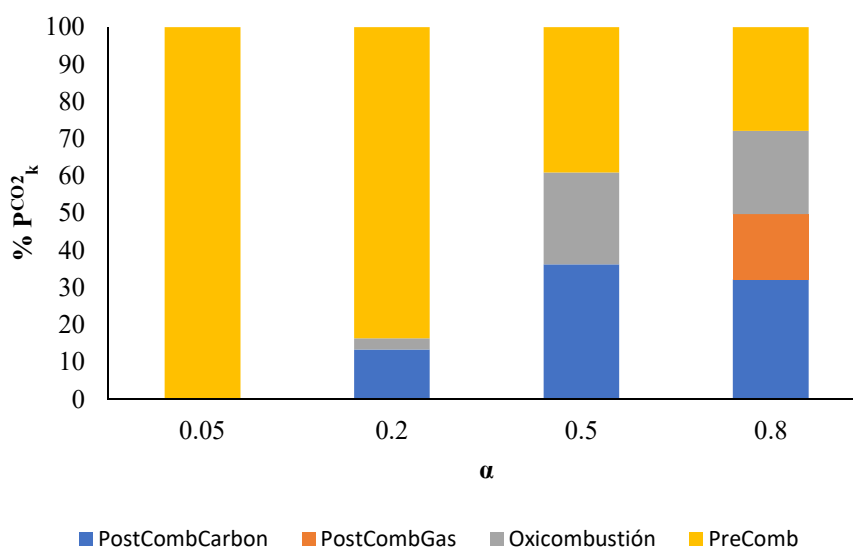


Figura 10. . Porcentaje de CO₂ procesado a través de la tecnología k para diferentes valores de α .

5.4.Optimización red de suministros CCUS y comprobación con el artículo de d'Amore (2020). Escenarios (A-C)

Los resultados óptimos de la cadena de suministros CCS, sin tener en cuenta la etapa de utilización del CO₂, ha sido incluida en el presente trabajo a modo comparativo (Escenario 0). En el caso de la cadena de suministros CCUS se optimizó, del mismo modo que para España, de acuerdo con el objetivo mínimo europeo de reducción de emisiones de CO₂ (α) igual al 50% del total de las emisiones de grandes fuentes estacionarias europeas [62]. Recordando que, ante la necesidad de reformular el modelo para la resolución del problema a nivel europeo, diferenciando entre modos de transporte, se llevó a cabo la resolución del modelo, eliminando el conjunto I . Además estos resultados se han comparado con los obtenidos por d'Amore (2020). Los resultados no coinciden por motivos de las diferencias comentadas anteriormente, pero los porcentajes de variación entre los resultados mostrados por d'Amore (2020) sí que coinciden con las variaciones obtenidas en este TFM, como se va a demostrar a continuación.

Tabla 4: Resultados para los escenarios 0, A, B, y C.

Escenario	Modelo	Demanda	CT [€/t/año]	CTC [€/t/año]	CTT [€/t/año]	CTS [€/t/año]	Beneficio [€/t/año]
0	CCS		16.04	14.23	1.63	0.17	-
A ₁	CCUS	1x	10.44	14.43	1.76	0.17	5.92
A ₂	CCUS	2x	4.46	14.88	1.53	0.16	12.07
A ₃	CCUS	3x	-1.62	15.08	1.49	0.16	18.35
B	CCUS	1x	11.15	14.57	2.30	0.17	5.89
C	CCUS	1x	10.99	14.61	1.58	0.17	5.36

Tabla 5: Resultados para los escenarios 0, A, B, y C por d'Amore 2020.

Escenario	Modelo	Demanda	CT [€/t/año]	CTC [€/t/año]	CTT [€/t/año]	CTS [€/t/año]	Beneficio [€/t/año]
0	CCS		32.59	30.69	1.64	0.25	-
A ₁	CCUS	1x	31.16	30.77	1.57	0.25	1.44
A ₂	CCUS	2x	29.78	30.80	1.61	0.24	2.87
A ₃	CCUS	3x	28.46	30.86	1.64	0.23	4.27
B	CCUS	1x	32.07	30.78	2.32	0.42	1.44
C	CCUS	1x	31.90	30.77	1.64	0.25	0.76

En el presente trabajo se han estudiado cuatro escenarios (Tabla 4 y 5). Como hemos comentado anteriormente, en el escenario 0, se ha realizado la optimización de la cadena de suministros sin tener en cuenta la etapa de utilización del CO₂. En el escenario A_{D1} se asume que la producción de los productos químicos PPP y MeOH no puede ser mayor que la producción europea actual (2.4 Mt/año PPP y 12 Mt/año MeOH) y que toda la electricidad necesaria para realizar los procesos de conversión y utilización proviene de fuentes de energía libres de emisiones de carbono, por lo tanto, se ha despreciado las emisiones indirectas de CO₂ (U_g^{Ind}) y, en consecuencia, la restricción impuesta por la ecuación (34) se ha excluido de la optimización del modelo. En los escenarios A_{D2} y A_{D3} se ha analizado un aumento hipotético de la demanda de los dos productos químicos, se ha considerado que dichas demandas son dos y tres veces más altas que la actual, respectivamente. En el escenario B, se estudió la influencia del hecho de que algunos países europeos no permiten el secuestro de CO₂ en estructuras geológicas costeras [62], lo que conlleva a una reducción del 37% de la capacidad de almacenamiento europea. Finalmente, el escenario C analiza la respuesta del modelo teniendo en cuenta la ecuación (33), este último escenario nos permitirá conocer la cadena de suministros CCUS óptima a nivel europeo.

5.4.1. Escenario A

En el escenario A_{D1} se requiere un coste total CT [€/t/año] para la instalación y operación de la cadena de suministros CCUS un 34.95% menor que el obtenido para el Escenario 0 (Tabla 4). Esto se debe al beneficio generado al introducir la conversión química del CO_2 capturado, generando algunos ingresos, siendo el beneficio en el escenario A_{D1} igual a 5.92 [€/t/año]. La posibilidad de conversión química del CO_2 conlleva un costo de captura CTC [€/t/año] casi idéntico, que aumenta ligeramente de 14.23 €/t/año (Escenario 0) a 14.43€/t/año (Escenario A_{D1}). Por otro lado, el escenario A_{D1} presenta una infraestructura de transporte casi sin cambios con respecto al Escenario 0, a pesar de la necesidad de transportar no solo el CO_2 que se destina a secuestro, sino también el CO_2 que se alimenta a las plantas de conversión (esta última cantidad es tan pequeña que no afecta a la estructura general de la red de transporte). Este resultado no es sorprendente si consideramos que se impone la misma cantidad total de CO_2 para ser capturado de fuentes estacionarias en todos los escenarios y, por lo tanto, se debe enviar el mismo caudal total entre los nodos (independientemente de la elección de secuestro o utilización). Como resultado, el costo total de transporte CCT varía ligeramente de 1.63€/t/año (Escenario 0) a 1.76€/t/año (Escenario A_{D1}). La explotación del almacenamiento geológico disminuye levemente con respecto al Escenario 0 (es decir, -3.15%) (Tabla 6), coincidiendo con la reducción del 2.43% obtenida por el artículo (Tabla 7). Los costos totales de secuestro CTS [€/t/año] se mantienen sin cambios entre el Escenario 0 y el Escenario A_{D1} 0.17 [€/t/año], esta observación también se aprecia en d'Amore 2020. El 2.86% del CO_2 total capturado (2,43% en el artículo), es utilizado en el proceso de conversión de productos químicos, por lo tanto, el resultado es comparable con el límite superior del 1% estimado para la conversión [63].

Tabla 6: Resultados para los escenarios 0, A, B, y C.

Escenario	Modelo	Demanda	U_g^{Seq}	$U_{\Psi,g}^{conv}$	U_g^{Direct}	U_g^{Ind}
			[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]
0	CCS		594.36	-	-	-
A_{D1}	CCUS	1x	575.64	16.99	1.37	64.33
A_{D2}	CCUS	2x	558.48	33.97	2.74	128.66
A_{D3}	CCUS	3x	539.76	50.96	4.12	192.98
B	CCUS	1x	578.76	16.99	1.37	64.33
C	CCUS	1x	577.20	16.99	1.37	11.44

Tabla 7: Resultados para los escenarios 0, A, B, y C por d'Amore 2020.

Escenario	Modelo	Demanda	U_g^{Seq}	$U_{\psi,g}^{conv}$	U_g^{Direct}	U_g^{Ind}
			[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]	[Mt/año]
0	CCS		698.57	-	-	-
A _{D1}	CCUS	1x	681.59	16.99	1.37	64.39
A _{D2}	CCUS	2x	664.60	33.97	2.74	128.72
A _{D3}	CCUS	3x	647.61	50.96	4.11	193.06
B	CCUS	1x	681.59	16.99	1.37	64.33
C	CCUS	1x	681.59	16.99	1.37	15.62

El coste de una CS de CO₂ variaría si la producción de productos químicos se duplicase o triplicase respecto a los valores europeos actuales (es decir, con respecto al Escenario A_{D1}) (Tablas 4, 5, 6 y 7). En consecuencia, triplicar la producción de ambos productos químicos corresponde a un aumento de la cuota de producción europea de 25.5% PPP y 9.6% MeOH (Escenario A_{D1}) a 76.6% PPP y 28.8% MeOH (Escenario A_{D3}). Bajo estos supuestos, los resultados de la configuración óptima de CCUS muestran que la sobreproducción de los dos productos químicos afecta principalmente el coste total de la CS, que podría reducirse en aproximadamente un 115.50% en caso de que la producción de ambos químicos se triplicara con respecto a los valores actuales. Este valor difiere con el mostrado por el artículo, donde esta reducción es solo del 8.66%. Por otro lado, la contribución de la utilización de CO₂ sobre la captura pasaría del 2.86% (Escenario A_{D1}), siendo de 2.43% en d'Amore (2020), a un máximo de 8.57% (Escenario A_{D3}) (Figura 14), 7.29% en el artículo. Esto significa que, para evitar completamente la necesidad de secuestro de CO₂, se requiere un aumento masivo de la producción europea de PPP y MeOH a más de 38 veces el actual.

En términos de ahorro de GEI, el Escenario A_{D3} permitiría una disminución anual neta de CO₂ debido a la utilización de 55.08 Mt/año, frente a solo 18.36 Mt/año para el Escenario A_{D1} (Figura 12). La configuración final de la CS para el Escenario 0 se informa en la Figura 11.

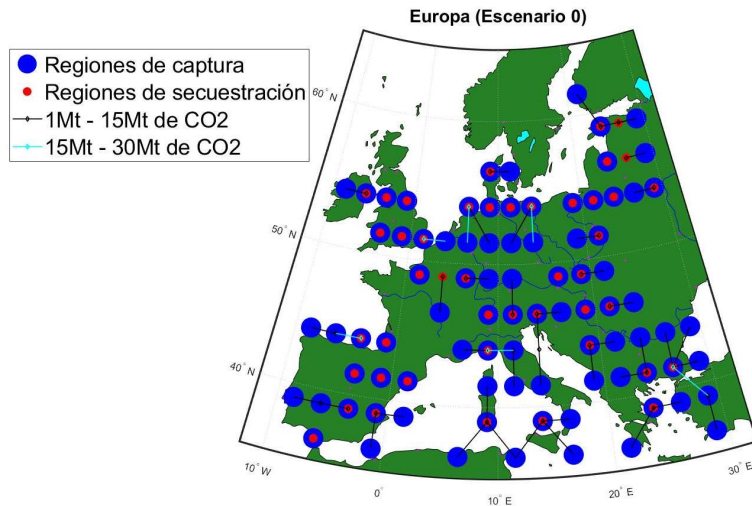


Figura 11. Configuración final de la CS para el Escenario 0.

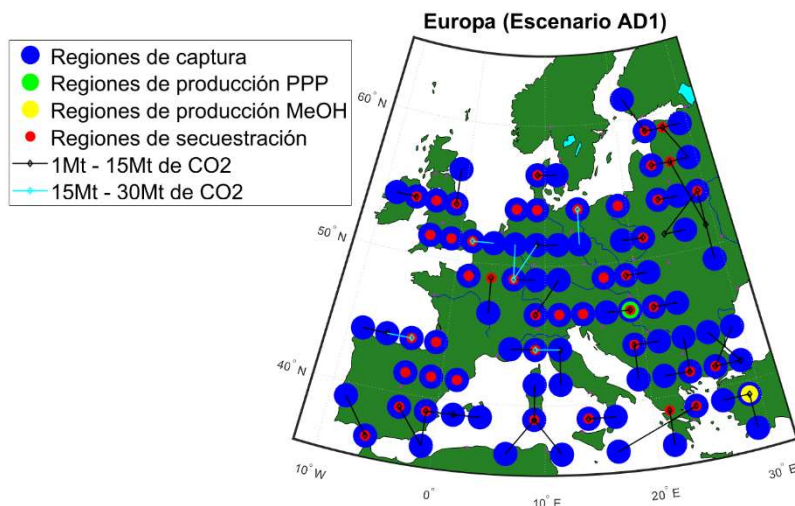


Figura 12. Configuración final de la CS para el Escenario A_{D1} .

Para el Escenario A_{D2} (Figura 13), el diseño de la CS no cambia con respecto al Escenario A_{D1} , ya que duplicar la demanda de los productos químicos solo determina que las plantas de conversión deben ser más grandes, mientras que su ubicación e infraestructura no se ven afectadas.

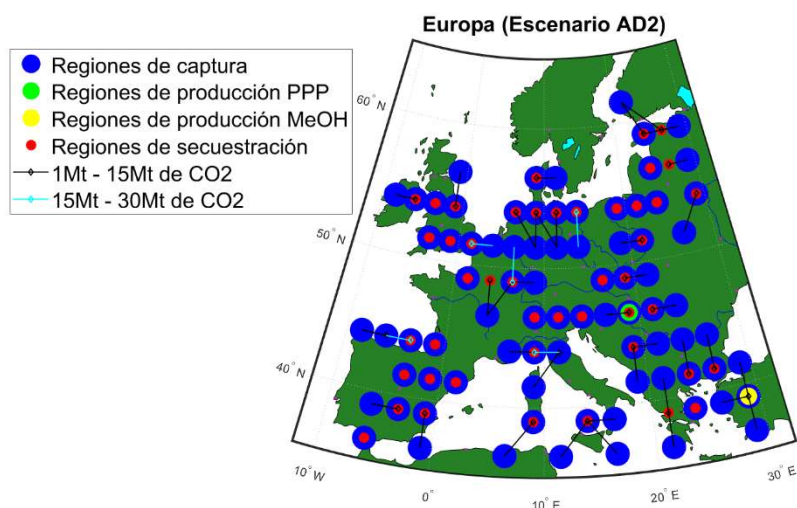


Figura 13. Configuración final de la CS para el Escenario A_{D2} .

En cambio, para el Escenario A_{D3} (Figura 14) el diseño de la CS cambia respecto al Escenario A_{D1} y el Escenario A_{D2} , dado que para poder garantizar la demanda de MeOH se necesitan tres plantas de conversión, todas ellas situadas en Turquía, mientras que la planta de conversión para el PPP no cambia, únicamente debe ser más grande.

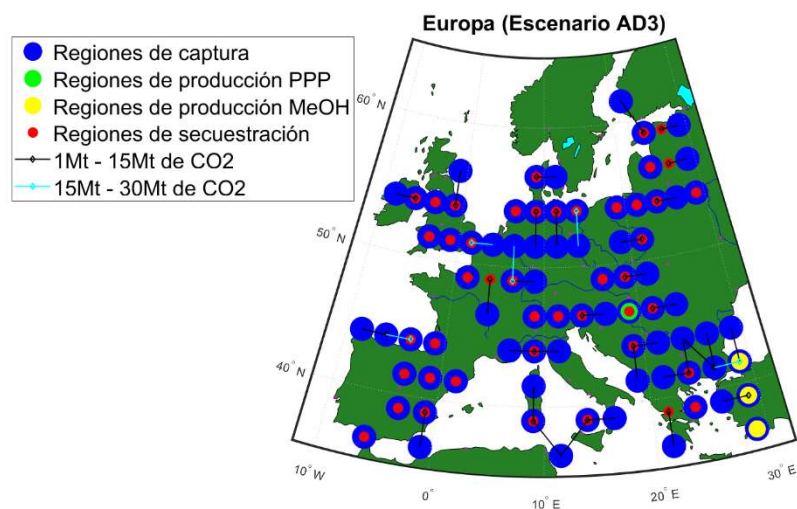


Figura 14. Configuración final de la CS para el Escenario A_{D3} .

Cabe destacar que las configuraciones finales de la cadena de suministros son casi idénticas entre el Escenario 0 y el Escenario A_{D1} . Los nodos de captura no cambian prácticamente, por lo que el factor principal para establecer los arcos de transporte entre las regiones es la ubicación de las zonas de secuestro del CO_2 . En cuanto a la etapa de utilización, las instalaciones de conversión están ubicadas en regiones que permiten una reducción de los costes de producción, es decir, Hungría (PPP) y Turquía (MeOH). De hecho, se verificó que los parámetros clave que afectan la selección de los sitios de la planta son la tasa del impuesto corporativo de cada una de las regiones

(tax_g), el coste de las materias primas ($\text{Raw}_{\Psi,g}$) [€/t de producto químico/año] y el precio de la energía [€/kWh]. Con respecto a las tasas de impuestos corporativos, existe una gran variabilidad en toda Europa (Tabla A7), desde un mínimo del 9% (Hungria) hasta un máximo del 34% (Bélgica). La tasa de impuestos corporativos de Turquía está cerca de la media europea, un 20%. Como consecuencia, la construcción de plantas en Hungria se justifica principalmente por su competitividad en las tasas del impuesto de sociedades. Por otro lado, Turquía se caracteriza por los bajos costos de las materias primas (Tabla A8) y los servicios públicos, $\text{util}_{\Psi,g}$ (Tabla A9). En particular, Turquía tiene el precio de electricidad más barato entre los países analizados (0.0187 €/kWh) (Tabla A7). En consecuencia, la presencia de una planta para producir MeOH en Turquía es bastante justificable a pesar de la alta intensidad energética que requiere su proceso de producción. En resumen, la ubicación de las plantas para la conversión de CO₂ en PPP se basa principalmente en impuestos bajos, ya que este proceso consume menos energía. Por el contrario, con respecto a la producción de MeOH, su posicionamiento óptimo está determinado principalmente por el coste de las materias primas y los servicios públicos (y, en particular, de la electricidad). Los costes de mano de obra no parecen tener un impacto relevante a la hora de elegir las ubicaciones de las instalaciones de conversión de CO₂. La red de suministro mostrada por d'Amore (2020) (Figura 32) no coinciden con los escenarios 0 y A_{D1}, debido a las diferencias comentadas anteriormente, pero la ubicación de la planta de producción de PPP sí que coincide con la de d'Amore (2020), además las plantas donde se puede construir plantas de MeOH también coinciden con el artículo correspondiendo con la explicación, por lo que se cree que los resultados son adecuados.

5.4.2. Escenario B

El escenario B considera el hecho de que algunos países restringen (República Checa, Alemania, Polonia, Suecia, Países Bajos y el Reino Unido) o prohíben (Austria, Croacia, Estonia, Irlanda, Letonia, Finlandia y Bélgica) el almacenamiento del carbono en zonas costeras, debido a que contribuye a la acidificación de las aguas y puede crear graves problemas a la vida submarina, y por ende a la cadena alimenticia. Además, existe el riesgo de que el CO₂ vuelva a la atmósfera por las corrientes oceánicas o las tormentas, esta limitación reduce en un 37% la capacidad de almacenamiento de la UE [62]. Los resultados muestran que el coste total CT [€/t/año] es un 6.37% más caro con respecto al Escenario A_{D1}, este valor es de 2.83% en el artículo, mientras que los costes de captura CTC [€/t/año] y secuestro CTS [€/t/año] se mantienen sin cambios (Tabla 4), así como la tecnología de captura seleccionada es la misma. Por otro lado, de manera análoga a lo observado en d'Amore 2017 [30] para CCS CS, la red CCUS óptima implica una infraestructura de transporte más compleja y costosa (+ 23.46% en términos de CTT [€/t/año]). En d'Amore (2020), el coste de la infraestructura aumenta en un 32.33%. Estos gastos adicionales son una consecuencia de la necesidad de transportar los flujos de CO₂ hacia las cuencas de

secuestro que aún están disponibles una vez que se tienen en cuenta los marcos legales nacionales (Figura 15). En cuanto al CO₂ explotado para fines de conversión y utilización, el marco legal restrictivo para el almacenamiento en tierra produce resultados idénticos respecto al Escenario A_{D1}, un 2.86% del CO₂ capturado se destina a la conversión y utilización.

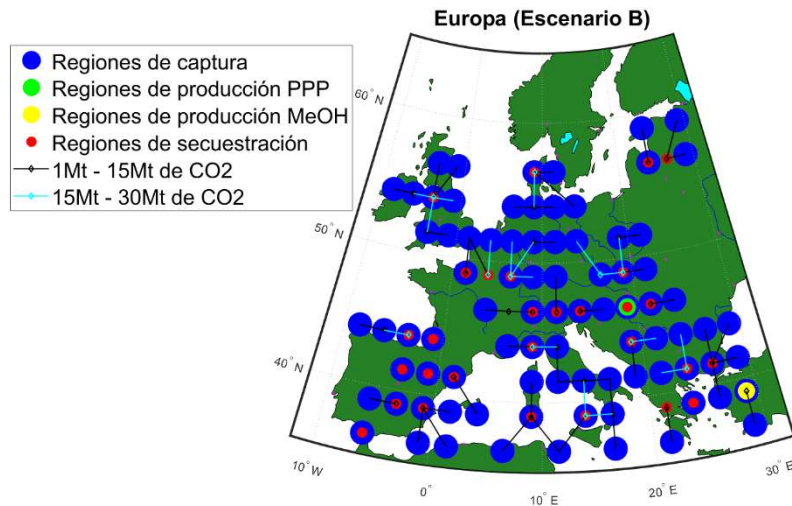


Figura 15: Configuración final de la CS para el Escenario B.

5.4.3. Escenario C

Los escenarios A-B mencionados anteriormente investigaron el diseño óptimo de una CS CCUS a nivel europeo sin tener en cuenta las emisiones indirectas de CO₂. El Escenario C, optimiza la red CCUS europea teniendo en cuenta las intensidades de carbono de la electricidad específicas del país (Tabla A10). Como resultado, la producción de MeOH ahora se encuentra en República Checa, que es un país caracterizado por una baja intensidad de carbono de la electricidad (es decir, 0.02364 tCO₂/GJ) y los parámetros de los costes de producción (Figura 16).

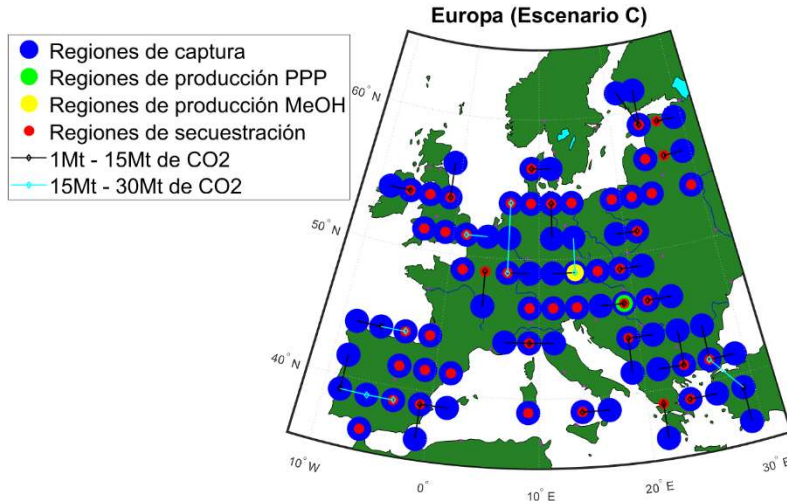


Figura 16: Configuración final de la CS para el Escenario C.

Como en el escenario A_{D1} , la planta de producción de PPP se encuentra en Hungría. El inconveniente de mantener negativas las emisiones netas de CO_2 radica en el ligero aumento de los costes totales, un 5.08% más respecto al Escenario A_{D1} , siendo 2.32% en el artículo, que se debe a una caída del beneficio total obtenido por la venta de productos químicos (−10.35% respecto al Escenario A_{D1}) (Tabla 4 y 5), que corresponde con la tendencia de caída del 47.22% del artículo. En general, el Escenario C demuestra que las emisiones indirectas de CO_2 generadas por los procesos de conversión a productos químicos con valor añadido (es decir, U_g^{Ind}) podrían desempeñar un papel clave en la determinación de la economía y en el diseño de una red CCUS europea, pero que, en general, se puede obtener una solución satisfactoria que conlleve emisiones de CO_2 negativas y al mismo tiempo generar algún beneficio tanto de PPP como de MeOH. Además, la contribución de las emisiones adicionales directas de CO_2 de la utilización (es decir, U_g^{Direct}) fue minoritaria en todos los escenarios analizados (Tabla 6 y 7). Las tendencias de las variaciones obtenidas coinciden con las de d'Amore 2020, por lo que se cree que la forma de proceder ha sido correcta. Además la red de suministro propuesta por d'Amore 2020 (Figura 33) de los escenarios B y C no coincide con la obtenida, esto es debido a los cambios comentados anteriormente, pero la ubicación de las plantas de producción de los productos químicos sí, por lo que como se ha mencionado antes los resultados son posibles.

5.5. Influencia del límite mínimo de reducción de CO_2 impuesto por la UE (α).

En este apartado se va a realizar un estudio sobre la influencia del límite mínimo de captura de emisiones de CO_2 (α) establecido por la UE sobre el coste total y la configuración óptima final de la red CCUS. Para ello, hemos analizado cuatro valores de $\alpha = \{0.05, 0.2, 0.5, 0.70\}$.

La Figura 17, muestra las configuraciones finales de CS CCUS para los diferentes escenarios evaluados. Se puede observar que la complejidad de la red aumenta a medida que el valor de α

aumenta, dado que esto implica que mayores caudales de CO₂ deben capturarse, transportarse y almacenarse en Europa pasando de 60 Mt/año para $\alpha = 0.05$ a 835 Mt/año para $\alpha=0.7$. Cabe destacar que a valores bajos de α , la captura de CO₂ se opera en regiones con almacenamientos geológicos disponibles para su almacenamiento (por ejemplo, Reino Unido y España). A medida que la captura de CO₂ aumenta se hace necesario el transporte para equilibrar el almacenamiento ($\alpha=0.5$ y $\alpha=0.7$). En general, en la mayoría de las regiones g, se pueden secuestrar más CO₂ que capturar, lo que demuestra el potencial cuantitativo que tienen los territorios costeros europeos para las aplicaciones de una CCUS.

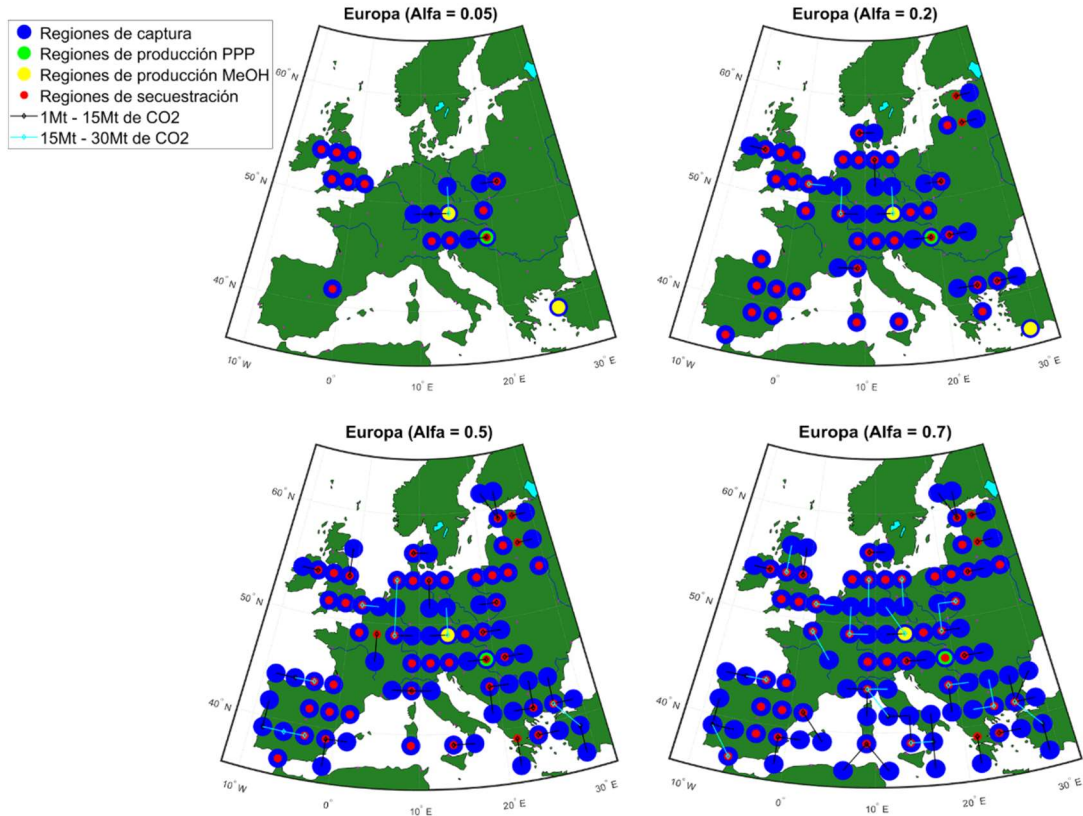


Figura 17: Configuración final de la CS para Escenario E ($\alpha=0.05$), Escenario F ($\alpha=0.2$), Escenario G ($\alpha=0.5$) y Escenario H ($\alpha=0.7$).

Respecto a la etapa de utilización del CO₂ podemos observar el mismo comportamiento anteriormente detallado, para los Escenarios (E-F) las plantas de producción de los productos químicos se encuentran situadas en Hungría (PPP) y en Turquía (MeOH), debido al bajo valor de la tasa del impuesto corporativo de cada uno de los países (tax_c), el coste de las materias primas (Raw_{Ψ_g}) [€/t de producto químico/año] y el precio de la energía [€/kWh]. A medida que aumenta la cantidad de CO₂ capturado las planta de conversión del PPP sigue situada en Hungría, pero la de MeOH ahora se encuentra en Republica Checa, país caracterizado por una baja intensidad de carbono de la electricidad (es decir, 0.02364 tCO₂/GJ).

En general, los resultados económicos están determinados por los costes de captura (Tabla 8), que representan hasta un 90% (Escenario F) de la inversión total, mientras que los costes de transporte y secuestro son muy bajos respecto al CTC [€/t/año]. Como cabría esperar a mayor coste total (mayor α), menor beneficio se obtiene al instalar un sistema de CCUS.

Tabla 8: Resultados económicos variando el objetivo europeo de reducción de emisiones de carbono, α .

Escenario	α	Demanda	CT	CTC	CTT	CTS	Beneficio
			[€/t/año]	[€/t/año]	[€/t/año]	[€/t/año]	[€/t/año]
E	0.05	1x	-45.07	14.96	1.82	0.14	61.99
F	0.2	1x	1.04	13.20	1.51	0.16	13.83
G	0.5	1x	10.99	14.61	1.58	0.17	5.36
H	0.7	1x	13.18	15.02	1.80	0.17	3.80

En relación con la selección de las tecnologías de captura (Figura 18), la opción menos elegida por el modelo es la oxidación, mientras que precombustión y postcombustión se instalan en todos los escenarios. Como podemos observar, a medida que aumenta el valor del parámetro α , la cantidad de CO₂ procesado a través de la tecnología de postcombustión de carbón aumenta respecto a la tecnología de precombustión, que inicialmente (es decir, a valores bajos de α) es mayoritaria debido a que es más económica, aunque sólo se puede aplicar a centrales eléctricas alimentadas con gas natural.

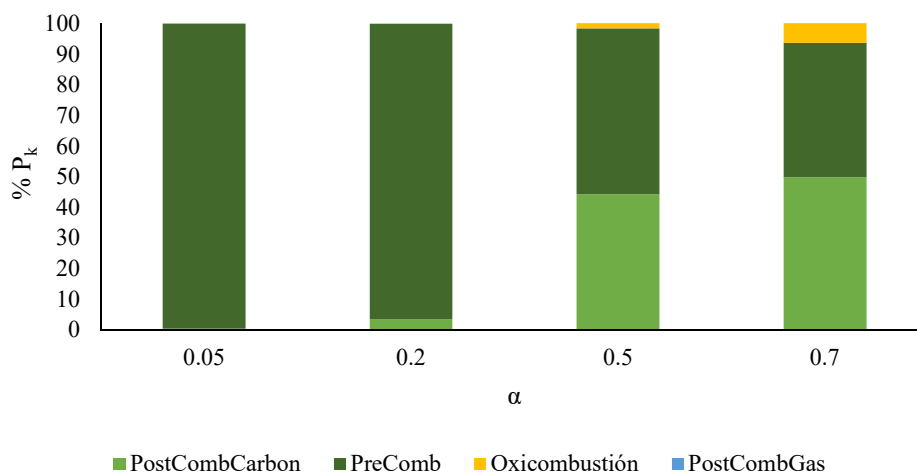


Figura 18. Porcentaje de CO₂ procesado a través de la tecnología k para diferentes valores de α .

Por lo tanto, a medida que α es más restrictivo menor beneficio se obtiene debido a que sólo el 1.52% del CO₂ capturado se emplea en la conversión del CO₂ y más caudal de CO₂ es procesado a través de la tecnología de captura de postcombustión, la cual, actualmente es la más cara, lo que justificaría la gran contribución de los costes de captura respecto a los costes generales (Figura

19). Para alcanzar el objetivo de la UE de reducir un 55% las emisiones de carbono respecto a 1990, no solo hay que aumentar el límite mínimo de captura de las emisiones de carbono de las grandes fuentes estacionarias europeas, sino que los procesos en los cuales se emplea dicho CO₂ deben aumentar casi un 38% respecto al uso actual, con el fin de convertir a las tecnologías de CCUS en opciones interesantes, no solo a nivel medioambiental también a nivel económico.

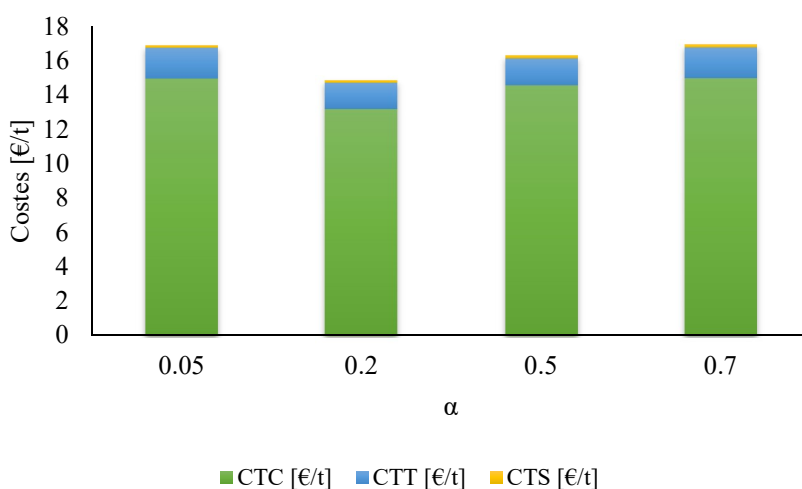


Figura 19. Contribución del CTC, CTT y CTS sobre los costes para los diferentes valores de α .

6. Discusión y limitaciones.

El análisis preliminar demuestra que la CCUS en general tiene poca contribución en la lucha de la Unión Europea de reducir un 55% las emisiones de GEI para 2030. Al igual que el bajo impacto económico (sólo una disminución del 4.4%) sobre los costes de instalación de un sistema de captura y almacenamiento de CO₂. Bien es cierto, que se trata de un modelo con diversas limitaciones. Una de las principales críticas es la escasa implantación de tecnologías de captura, así como los escasos procesos de conversión del CO₂, por lo que la demanda de CO₂ se limitó para la producción de productos químicos. Lo que conllevaría a la necesidad de realizar un estudio integral para considerar otras vías (por ejemplo, materiales de construcción, EOR, industria del cemento, etc.). A pesar de ello, cabría destacar que nuevas políticas y cambios tecnológicos pueden determinar grandes variaciones en los próximos años. De hecho, el MeOH comienza a emplearse en una amplia gama de aplicaciones, por ejemplo, como combustible en los sectores de transporte y energía, síntesis de hidrocarburos, etc. [69]. Por lo que, consideramos un error imponer como límite superior la demanda actual de CO₂ para el proceso de conversión estudiado a medio y largo plazo.

Además, este modelo asume que las tecnologías de producción tradicionales de PPP y MeOH serían sustituidas por aquellas basadas en la conversión del CO₂, de modo que toda la producción

europea dependería del CO₂ como materia prima. Sin embargo, dicha suposición teniendo en cuenta la situación actual, creemos que no sería posible, a no ser que toda la producción mundial siga un camino similar.

Por último, otra limitación es que la etapa de transporte no está modelada para los productos finales, por lo que creemos que para conseguir una descripción precisa de la configuración de transporte europea sería necesario una definición espacial de la demanda de mercado, dicho aspecto consideramos que se encuentra fuera del alcance del presente trabajo.

7. Conclusión

Este TFM demuestra el fuerte impacto que presenta la captura y el almacenamiento de CO₂. Además, se destaca la importancia económica que conlleva la utilización del CO₂ para la producción de productos químicos de interés. El análisis pone en evidencia el papel clave que desempeña las intensidades de carbono de energía (CI) en la elección de la instalación óptima de las plantas de conversión como consecuencia de contabilizar las emisiones de CO₂ tanto directas como indirectas de la etapa de conversión. Además, el estudio muestra el diseño de una red CCUS teniendo en cuenta los marcos legales nacionales sobre el almacenamiento geológico en las zonas costeras. En definitiva, este trabajo es una pequeña aportación más para futuras investigaciones sobre la optimización de las cadenas de suministro de captura, transporte, utilización y secuestro de carbono basadas en una amplia escala continental, mediante el uso de una metodología general.

8. Bibliografía

1. IPCC (2018). *Global Warming of 1.5°C. An IPCC Special Report on the Impacts of Global Warming of 1.5°C. Above Pre-industrial Levels and Related Global Greenhouse Gas Emission Pathways, in the Context of Strengthening the Global Response to the Threat of Climate Change*. Disponible online en: https://report.ipcc.ch/sr15/pdf/sr15_spm_final.pdf
2. CE (2020). Plan del Objetivo Climático para 2030. Disponible online en: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/PDF/?uri=CELEX:52020DC0562&from=EN>
3. IPCC, 2005. In Metz, B., Davidson, O., Coninck, H.c., Loos M., Meyer, L.A. (Eds.), IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA (442p.).
4. JRC, 2016. *Emission Database for Global Atmospheric Research (EDGAR)*. Join Research Centre, European Commission. Disponible en: <https://edgar.jrc.ec.europa.eu/>
5. <https://www.methanex.com/our-business/pricing>.
6. Bui, M., Adjiman, C. S., Bardow, A., Anthony, E. J., Boston, A., Brown, S., et al. (2018). Carbon capture and storage (CCS): the way forward. *Energy Environ. Sci.* 11, 1062–1176. doi: 10.1039/c7ee02342a.
7. Rafiee, A., Rajab Khalilpour, K., Milani, D., and Panahi, M., *Trends in CO₂ conversion and utilization: A review from process systems perspective*. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2018. **6**(5): p. 5771-5794.
8. Mac Dowell, N., Fennell, P.S., Shah, N, and Maitland, G. C. *The role of CO₂ capture and utilization in mitigating climate change*. *Nature Climate Change*, 2017. **7**: p. 243.
9. Alvarado, V. and Manrique, E., Enhanced oil recovery: An update review *Energies*, 2010. **3**(9): p. 1529-1575.
10. Aresta, M., Dibenedetto, A., and Angelini, A., *The changing paradigm in CO₂ utilization*. *Journal of CO₂ Utilization*, 2013. **3-4**: p. 65-73.
11. Huang, C. H. and Tan, C. S., *A review: CO₂ utilization*. *Aerosol and Air Quality Research*, 2014. **14**(2): p. 480-499.
12. Abrol, S. and Hilton, C. M., *Modeling, simulation and advanced control of methanol production from variable synthesis gas feed*. *Computers and Chemical Engineering*, 2012. **40**: p. 117-131.
13. Kätelhön, A., Meys, R., Deutz, S., Suh, S., and Bardow, A., *Climate change mitigation potential of carbon capture and utilization in the chemical industry*. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2019. **116**(23): p. 11187.
14. European Commission. *EU Emissions Trading System (EU ETS)*. Accessed 20 August, 2019. Disponible en: https://ec.europa.eu/clima/policies/ets_en

15. European Commission, *A policy framework for climate and energy in the period from 2020 to 2030*, 2014: Brussels.
16. Den, X. L., Beavor, E., Porteron, S., and Iliescu, A., *Analysis of the use of auction revenues by the member states*, 2017, European Commission: Brussels.
17. International Carbon Action Partnership. *Home Page*. Accessed 9 September, 2019 from: <https://icapcarbonaction.com/en>
18. ZEP, 2011. The Cost of CO₂ Transport: Post-demonstration CCS in the EU. European Technology Platform for Zero Emission Fossil Fuel Power Plants, Brussels.
19. Morbee, J., Serpa, J., Tzimas, E., 2012. *Optimised deployment of a European CO₂ transport network*. Int. J. of Greenhouse Gas Control 7, 48–61.
20. EU GeoCapacity Project, 2009. Assessing European Capacity for Geological Storage of Carbon Dioxide: GeoCapacity Final Report. Disponible en: <http://www.geology.cz/geocapacity/publications>
21. CCSNetwork, 2015. 2015 Situation Report on the European Large Scale Demonstration Projects Network: Public Summary.: <https://hub.globalccsinstitute.com/sites/default/files/publications/199478/2015-situation-report-european-largescale-demonstration-projects-network.pdf>.
22. Global CCS Institute, 2017. Database of Current CCS Projects. Disponible en: http://www.globalccsinstitute.com/sites/www.globalccsinstitute.com/files/content/page/122973/files/status-ccs-project-database-current-26-05-2017_0.xls
23. Han, J. H., and Lee, I. B. (2012). *Multiperiod stochastic optimization model for carbon capture and storage infrastructure under uncertainty in CO₂ emissions, product prices, and operating costs*. Ind. Eng. Chem. Res. 51, 11445–11457. doi: 10.1021/le3004754.
24. Lee, S. Y., Lee, J. U., Lee, I. B., and Han, J. (2017). *Design under uncertainty of carbon capture and storage infrastructure considering cost, environmental impact, and preference on risk*. Appl. Energy 189, 725–738. doi: 10.1016/j.apenergy.2016.12.066.
25. Middleton, R. S., Keating, G. N., Viswanathan, H. S., Stauffer, P. H., and Pawar, R. J. (2012). *Effects of geologic reservoir uncertainty on CO₂ transport and storage infrastructure*. Int. J. Greenh. Gas Control 8, 132–142. doi: 10.1016/j.ijggc.2012.02.005.
26. Middleton, R. S., and Yaw, S. (2018). *The cost of getting CCS wrong: uncertainty infrastructure design, and stranded CO₂*. Int. J. Greenh. Gas Control 70, 1–11. doi: 10.1016/j.ijggc.2017.12.011.
27. Elahi, N., Shah, N., Korre, A., and Durucan, S. (2014). *Multi-period least cost optimisation model of an integrated carbon dioxide capture transportation and storage infrastructure in the UK*. Energy Procedia 63, 2655–2662. doi: 10.1016/j.egypro.2014.11.288.

28. Elahi, N., Shah, N., Korre, A., and Durucan, S. (2017). *Multi-stage stochastic optimisation of a CO₂ transport and geological storage in the UK*. Energy Procedia 114, 6514–6525. doi: 10.1016/j.egypro.2017.03.1787.
29. Kalyanarengan Ravi, N., Van Sint Annaland, M., Fransoo, J. C., Grievink, J., and Zondervan, E. (2016). *Development and implementation of supply chain optimization framework for CO₂ capture and storage in the Netherlands*. Comput. Chem. Eng. 102, 40–51. doi: 10.1016/j.compchemeng.2016.08.011
30. d'Amore, F., and Bezzo, F. (2017). *Economic optimisation of European supply chains for CO₂ capture, transport, and sequestration*. Int. J. Greenh. Gas Control 65, 99–116. doi: 10.1016/j.ijggc.2017.08.015
31. d'Amore, F., Mocellin, P., Vianello, C., Maschio, G., and Bezzo, F. (2018). *Economic optimisation of European supply chains for CO₂ capture, transport, and sequestration, including societal risk analysis and risk mitigation measures*. Appl. Energy 223, 401–415. doi: 10.1016/j.apenergy.2018.04.043
32. d'Amore, F., Lovisotto, L., and Bezzo, F. (2020). *Introducing social acceptance into the design of CCS supply chains: a case study at a European level*. J. Clean. Prod. 249:119337. doi: 10.1016/j.jclepro.2019.119337
33. Zhang, S., Liu, L., Zhang, L., Meng, Q., and Du, J. (2018). *Optimal planning for regional carbon capture and storage systems under uncertainty*. Chem. Eng. Trans. 70, 1207–1212. doi: 10.3303/CET1870202
34. Turk, G. A., Cobb, T. B., Jankowski, D. J., Wolsky, A. M., and Sparrow, F. T. (1987). *CO₂ transport: a new application of the assignment problem*. Energy 12, 123–130. doi: 10.1016/0360-5442(87)90116-2
35. Klok, Ø, Schreiner, P. F., Pagès-Bernaus, A., and Tomasgard, A. (2010). *Optimizing a CO₂ value chain for the Norwegian continental shelf*. Energy Policy 38, 6604–6614. doi: 10.1016/j.enpol.2010.06.031
36. Hasan, M. M. F., First, E. L., Boukouvala, F., and Floudas, C. A. (2015). *A multiscale framework for CO₂ capture, utilization, and sequestration: CCUS and CCU*. Comput. Chem. Eng. 81, 2–21. doi: 10.1016/j.compchemeng.2015.04.034
37. Agrali, S., Üçtuğ, F. G., and Türkmen, B. A. (2018). *An optimization model for carbon capture and storage/utilization vs. carbon trading: a case study of fossil-fired power plants in Turkey*. J. Environ. Manage. 215, 305–315. doi: 10.1016/j.jenvman.2018.03.054
38. Han, J. H., and Lee, I. B. (2013). *A comprehensive infrastructure assessment model for carbon capture and storage responding to climate change under uncertainty*. Ind. Eng. Chem. Res. 52, 3805–3815. doi: 10.1021/ie301451e

39. Lee, S. Y., Lee, I. B., and Han, J. (2019). *Design under uncertainty of carbon capture, utilization and storage infrastructure considering profit, environmental impact, and risk preference*. Appl. Energy 238, 34–44. doi: 10.1016/j.apenergy.2019.01.058
40. Leonzio, G., Foscolo, P. U., and Zondervan, E. (2019). *An outlook towards 2030: optimization and design of a CCUS supply chain in Germany*. Comput. Chem. Eng. 125, 499–513. doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.04.001
41. Geske, J., Berghout, N., and van den Broek, M. (2015). *Cost-effective balance between CO₂ vessel and pipeline transport: part II—design of multimodal CO₂ transport: the case of the West Mediterranean region*. Int. J. Greenh. Gas Control 33, 122–134. doi: 10.1016/j.ijggc.2014.12.005
42. US National Academy of Sciences (2019). *Gaseous Carbon Waste Streams Utilization: Status and Research Needs*. Washington, DC: The National Academies Press.
43. EUROSTAT, 2016. *Energy Balances*. (Available at.). <http://ec.europa.eu/eurostat/web/energy/-balances>.
44. Rubin, E.S., Davison, J.E., Hezog, H.J., 2015. *The cost of CO₂ capture and storage*. Int. J. Greenhouse Gas Control 40, 378–400.
45. EU GeoCapacity Project, 2009. *Assessing European Capacity for Geological Storage of Carbon Dioxide: GeoCapacity Final Report*. (Available at:). www.geology.cz/geocapacity/publications.
46. Vangkilde-Pedersen, T., Anthonsen, K.L., Smith, N., Kirk, K., Neele, F., van der Meer, B., Le Gallo, Y., Bossie Codreanu, D., Wojcicki, A., Le Nindre, Y.M., Hendriks, C., Dalhoff, F., Christensen, N.P., 2009. *Assessing European capacity for geological storage of carbon dioxide—the EY GeoCapacity project*. Energy Procedia 1, 2663–2670.
47. Ogden, J.M., 2003. *Modeling infrastructure for a fossil hydrogen energy system with CO₂ sequestration*. In: *Proceedings of the 6th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies*. Kyoto, Japan, 2003. pp. 1069–1074.
48. Covestro (2017). *Investor Presentation Technical Report*. Available online at: <http://investor.covestro.com/en/presentations/presentations/> (accessed September 15, 2020).
49. IHS (2017). *Global Methanol Demand Growth Driven by Methanol to Olefins as Chinese Thirst for Chemical Supply Grows*. IHS Markit Says. Available online at: <http://news.ihsmarkit.com/press-release/country-industry-forecastingmedia/global-methanol-demand-growth-driven-methanol-olefi> (accessed September 15, 2020).
50. IEAGHG, 2002. *Transmission of CO₂ and Energy* [WWW Document]. <http://www.ieaghg.org/publications/technical-reports/17-publications/technical-evaluations/82-recently-published-technical-papers>.
51. van den Broek, M., Ramirez, A., Groenenberg, H., Neele, F., Viebahn, P., Turkenburg, W., Faaij, A., 2010. *Feasibility of storing CO₂ in the Utsira formation as part of a long-term*

- Dutch CCS strategy*. An evaluation based on a GIS/MARKAL toolbox. *Int. J. Greenh. Gas Control* 4, 351-366.
52. Fernández-Dacosta, C., Van Der Spek, M., Hung, C. R., Oregionni, G. D., Skagestad, R., Parihar, P., et al. (2017). Prospective techno-economic and environmental assessment of carbon capture at a refinery and CO₂ utilisation in polyol synthesis. *J. CO₂ Util.* 21, 405–422. doi: 10.1016/j.jcou.2017.08.005.
 53. Souza, L. F. S., Ferreira, P. R. R., Medeiros, J. L. De, Alves, R. M. B., and Arau, Q. F. (2014). *Production of DMC from CO₂ via indirect route: technical–economical–environmental assessment and analysis*. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 2, 62–69. doi: 10.1021/sc400279n.
 54. Wiesberg, I. L., de Medeiros, J. L., Alves, R. M. B., Coutinho, P. L. A., and Araújo, O. Q. F. (2016). *Carbon dioxide management by chemical conversion to methanol: hydrogenation and bi-reforming*. *Energy Convers. Manage.* 125, 320–335. doi: 10.1016/j.enconman.2016.04.041
 55. Turton, R., Baile, R. C., Whiting, W. B., Shaeiwitz, J. A., and Bhattacharyya, D. (2015). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*. 4th Edn. Upper Saddle River, NJ: Pearson Education, Inc.
 56. Sinnot, R., and Towler, G. (2009). *Chemical Engineering Design*. 5th Edn (Oxford: Butterworth-Heinemann).
 57. Aasberg-Petersen, K., Nielsen, C. S., Dybkjær, I., and Perregaard, J. (2008). *Large Scale Methanol Production From Natural Gas*. Haldor Topsoe, 22. Available online at: http://www.topsoe.com/sites/default/files/topsoe_large_scale_methanol_prod_paper.ashx.pdf (accessed March 29, 2018).
 58. d’Amore, F., and Bezzo, F. (2016). *Strategic optimisation of biomass-based energy supply chains for sustainable mobility*. *Comput. Chem. Eng.* 87, 68–81. doi: 10.1016/j.compchemeng.2016.01.003
 59. Sakakura, T., and Kohno, K. (2009). *The synthesis of organic carbonates from carbon dioxide*. *Chem. Commun.* 11, 1312–1330. doi: 10.1039/b819997c
 60. EEA (2019). *CO₂ Emission Intensity*. Available online at: <https://www.eea.europa.eu/data-and-maps> (accessed September 15, 2020)
 61. R. Ruiz-Femenia, G. Guillén-Gosálbez, L. Jiménez, J.A. Caballero (2013). *Multi-objective optimization of environmentally conscious chemical supply chains under demand uncertainty*. *Chem. Eng.*
 62. EC (2017). Report From the Commission to the European Parliament and the Council on Implementation of Directive 2009/31/EC on the Geological Storage of Carbon Dioxide. Available online at: https://ec.europa.eu/commission/sites/beta-political/files/report-carbon-capture-storage_en.pdf (accessed September 15, 2020).

63. Mac Dowell, N., Fennell, P. S., Shah, N., and Maitland, G. C. (2017). *The role of CO₂ capture and utilization in mitigating climate change*. Nat. Clim. Change 7, 243–249. doi: 10.1038/nclimate3231.
64. Eurostat, 2016. Energy Balances [WWW Document]. <http://ec.europa.eu/eurostat/web/n%0Aenergy/data/energy-balances>
65. Eurostat, 2017a. Labour costs database [WWW Document]. <http://ec.europa.eu/eurostat/web/labour-market/labour-costs/database>
66. Eurostat, 2017b. Energy price statistics [WWW Document]. http://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php/Energyn_pricen_statistics
67. Eurostat, 2017c. Natural gas price statistics [WWW Document]. http://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php/Naturaln_gasn_pricen_statistics
68. IEA, 2018. World Energy Outlook 2018 [WWW Document]. <https://www.iea.org/weo2018/>.
69. IEA, 2013. Technology Roadmap: Energy and GHG Reductions in the Chemical Industry via Catalytic Processes [WWW Document]. <https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/TechnologyRoadmapEnergyandGHGReductionsInTheChemicalIndustryviaCatalyticProcesses.pdf>.

9. Notación

Sets

δ	Productos químicos de salida
c	Países
g	Regiones
k	Tecnologías de captura
l	Modo de transporte del CO ₂
Ψ	Productos químicos
p	Intervalos de transporte

Subsets

$cRg(c,g)$	Asignación de las regiones a cada uno de los países
------------	---

Parámetros

α	Objetivo Europeo de reducción de CO ₂ [%]
A^{Ψ}	Escalar A para calcular el coste de producción de los productos químicos Ψ
B^{Ψ}	Escalar B para calcular el coste de producción del productos químicos Ψ
C^{Ψ}	Escalar C para calcular el coste de producción del productos químicos Ψ
CCR^{Seq}	Tasa de costo de capital del pozo de inyección [%]
CI_g	Intensidad de emisión de carbono en la región g [t/GJ]
d_g	Valor medio de profundidad de inyección de los pozos en las regiones g [km]
ECC_{Ψ}	Consumo de energía eléctrica para la producción de productos químicos [GJ/tCO ₂]
η_{Ψ}^C	Eficiencia de conversión del proceso para la generación de productos químicos Ψ [t/t]
η_{Ψ}^R	Cantidad de CO ₂ para producir una cantidad unitaria de productos químicos Ψ [t/t]

$FCl_{\Psi}^{Intercept}$	Matriz de coeficientes de intersección de los costos de capital de la instalación linealizados para la producción de los productos químicos Ψ [€/año]
FCl_{Ψ}^{Slope}	Matriz de coeficientes de pendiente de los costos de capital de instalación linealizados para la producción de los productos químicos Ψ [€/año]
f^{Ship}	Factor de coste para el transporte a través de barcos [€/tCO ₂ / km ²]
$lab_{\Psi,g}$	Coste de mano de obra para la producción de los productos químicos Ψ en la región g [€/t/año]
LD_g	Mitad del tamaño diagonal de la célula de la región g [km]
$LD_{g,g'}$	Distancia lineal entre la región g y la región g' [km]
m_1	Parámetro de coste de construcción de pozos y posterior inyección de CO ₂ [€/km/año]
m_2	Parámetro de coste de construcción de pozos y posterior inyección de CO ₂ [€/km/año]
$m_{\delta,\Psi}^{output}$	Caudal másico de salida δ para producir el producto químico Ψ [t/año]
N_{max}	Caudal máximo que se puede procesar a través de un pozo [t/pozo/año]
OM^{seq}	Tasa de mantenimiento del pozo de inyección [%]
off_g	Coste adicional del pozo de inyección en alta mar
$P_{\delta,\Psi}$	Precio unitario de los productos básicos δ para la producción de productos químicos Ψ [€/año]
p_g^{Total}	Cantidad de CO ₂ antropogénico que es generado en la región g [tCO ₂ /año]
Q_p	Caudal transportado en función de los intervalos p [tCO ₂ /año]
$Raw_{\Psi,g}$	Coste unitario de las materias primas para producir los productos químicos Ψ en la región g [€/t/año]
$Rb_{\Psi,g}$	Ingresos unitarios de los productos químicos Ψ en la región g [€/t/año]
R	Radio de la tierra [km]
tax_g	Fiscalidad en la región g [%]
τ_g	Factor de tortuosidad en la región g

UCC_k	Coste unitario de captura a través de la tecnología k [€/t/año]
$U_{\Psi,g}^{max}$	Productividad máxima de los productos químicos Ψ en la región g [t/año]
U_{Ψ}^{ref}	Capacidad química de la planta de referencia [t/año]
USC_g	Precio unitario de secuestación [€/pozo/año]
U_g^{seqmax}	Disponibilidad máxima de almacenamiento en la región g [t/año]
$util_{\Psi,g}$	Coste unitario de los servicios para producir los productos químicos Ψ en la región g [€/t/año]
\overline{UTC}	Coste unitario de intra-conexión [€/tCO ₂ /km]
$UTC_{p,l}$	Coste unitario de transporte para el caudal p a través del modo de transporte l [€/km/t/año]
$y_{k,g}$	Viabilidad de la instalación de la tecnología k en la región g

Variables Continuas

<i>Beneficio</i>	Beneficio ganado de la venta de productos químicos [€/año]
$C_{k,g}$	Caudal capturado a través de la tecnología k en la región g [t/año]
$CF_{\Psi,g}$	Flujo de caja generado por la venta de productos químicos Ψ en la región g [€/año]
$COM_{\Psi,g}$	Coste de fabricación de los productos químicos Ψ en la región g [€/año]
CT	Coste total [€/año]
CTC	Coste total de captura [€/año]
CTS	Coste total de secuestación [€/año]
CTT	Coste total de transporte [€/año]
CTT^{Size}	Coste de interconexión con efectos de escala en el tamaño [€/año]
CTT^{Dist}	Coste de interconexión con efectos de escala de distancia [€/año]
CTT^{Intra}	Coste debido a los transportes de corta distancia dentro de cada región de captura g [€/año]
$d_{\Psi,g}$	Depreciación de los productos químicos Ψ en la región g [€/año]

$FCl_{\Psi,g}$	Capital fijo de inversión para producir los productos químicos Ψ en la región g [€/año]
N_g	Número de pozos de inyección instalados en la región g [pozos/año]
$P_{k,g}$	Caudal procesado a través de la tecnología k en la región g [t/año]
$Q_{g,l,g'}$	Caudal transportado desde la región g hasta la región g' a través del modo de transporte l [t/año]
$Q_{p,g,l,g'}$	Intervalos de caudal transportado p desde la región g hasta la región g' a través del modo de transporte l [t/año]
$R_{\Psi,g}$	Ingresos de ventas de los productos químicos Ψ en la región g [€/año]
$U_{\Psi,g}$	Cantidad de CO ₂ enviada al proceso de conversión para la producción de los productos químicos Ψ en la región g [t/año]
$U_{\Psi,g}^{chem}$	Cantidad de producto químico Ψ producido en la región g [t/año]
$U_{\Psi,g}^{conv}$	Cantidad de CO ₂ convertido y utilizado para producir el producto químico Ψ en la región g [t/año]
U_g^{Direct}	Emisiones directas de CO ₂ generadas por el proceso de conversión en la región g [t/año]
U_g^{Ind}	Emisiones indirectas de CO ₂ generadas por los procesos de conversión en la región g [t/año]
U_g^{Seq}	Cantidad de CO ₂ secuestrado en la región g [t/año]

Variables Binarias

$y_{\Psi,g}^{Chem}$	Tomará el valor de 1 si el producto químico Ψ es producido en la región g , en caso contrario 0
$y_{p,g,l,g'}^{Trans}$	Tomará el valor de 1 si el caudal de CO ₂ p es transportado desde g a g' a través del modo de transporte l .

Acrónimos

IEA	International Energy Agency
CE	Comisión europea
CCS	Captura y almacenamiento de dióxido de carbono

CCUS	Captura, almacenamiento y uso de dióxido de carbono
EDGAR	Emission Database for Global Atmospheric Research
EOR	Recuperación mejorada de petróleo
GEI	Gases de efecto invernadero
IPCC	Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático
JRC	Joint Research Centre
MeOH	Metanol
MILP	Mixed-Integer Linear Programming
PPP	Poliones de poliéter carbonato
SC	Cadena de suministros
UE	Unión Europea

10. Apéndices

10.1. Base de datos Emisiones para la Investigación Atmosférica Global (EDGAR).

La Base de Datos de Emisiones para la Investigación, cuyas siglas en inglés son EDGAR, proporciona las emisiones antropogénicas globales registradas en los últimos 50 años de gases de efecto invernadero y contaminantes atmosféricos por país. EDGAR se desarrolló a partir de un proyecto conjunto del Centro Común de Investigación (JRC) de la Comisión Europea y la Agencia de Evaluación Ambiental de los Países Bajos (PBL), y cuanta con más de un millón de descargas actualmente.

El cálculo de dichas emisiones se lleva a cabo a partir de las siguientes fuentes de información:

- **Datos de actividad de estadísticas internacionales**: venta de combustible, la producción industrial, agricultura.
- **Factores de emisión**: cantidad de un determinado contaminante que se emite tras la quema de una determinada cantidad de combustible.
- **Uso de las tecnologías y medidas de reducción**: empleo de filtros en los vehículos o en la chimenea de una central eléctrica.

Esta información nos permite describir estrategias de control para la mitigación de emisiones, realizar análisis de la tendencia de las emisiones y proyecciones a lo largo del tiempo, la modelización tanto regional como global de la contaminación atmosférica y el cambio climático, realizar un seguimiento de los cambios en las fuentes de emisiones, combustibles, tecnologías y medidas de reducción. Además, de evaluar las repercusiones actuales de las políticas a escala europea y mundial sobre el cambio climático.

Para finalizar este apartado cabe destacar que la base de datos EDGAR te permite descargar mapas de cuadrículas de 0.1° x 0.1° contruidos a partir de una base de datos geográfica utilizando conjuntos de datos indirectos espaciales con la ubicación de las instalaciones energéticas y de fabricación, las redes de carreteras, las rutas de transporte, densidad de la población humana y anual y el uso de las tierras agrícolas, que varían con el tiempo. Inicialmente los conjuntos de datos de entrada eran cuadrículas de puntos, líneas y áreas con distintas resoluciones y, utilizando técnicas de SIG (sistema de información geográfica) para la conversión, el remuestreo y la agregación, el conjunto de datos se ha incluido en una cuadrícula de 0.1° x 0.1° (Figura 2 y 20)

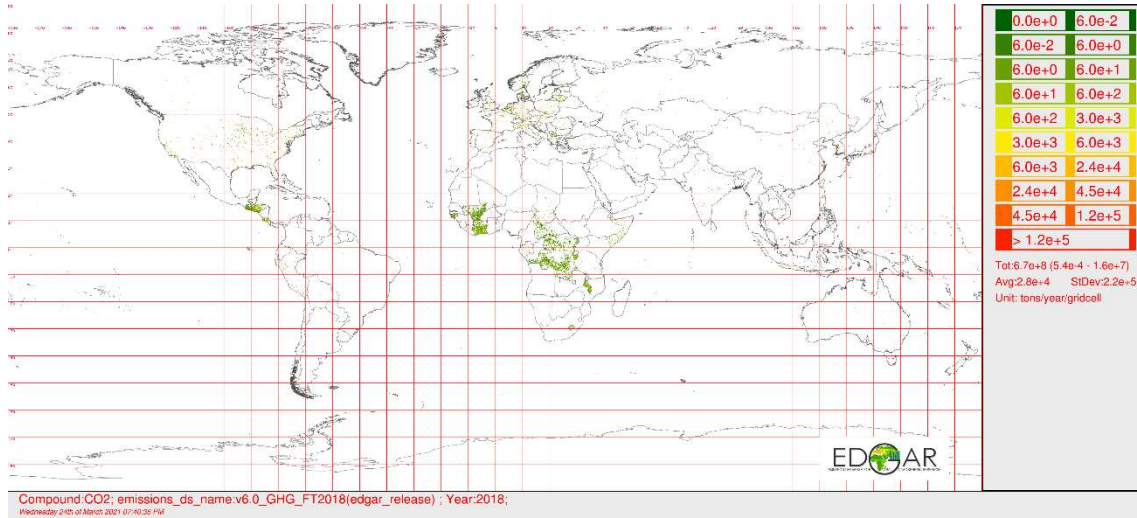


Figura 20: Mapa de emisiones a nivel mundial totales de CO₂ en el año 2018 para el sector de la industria energética (EDGAR, 2019).

10.2. Cálculo de la distancia lineal entre la región g y g' ($LD_{g,g'}$) a partir de longitud y latitud.

Según la posición de los focos de emisión, podemos realizar una representación espacial de Europa a través de una matriz de distancias entre las regiones g y g' $LD_{g,g'}[km]$, donde g y g' son diferentes. Para el cálculo de la distancia sobre la base esférica de la tierra (ignorando los efectos elipsoides) nos hemos basado en la ley esférica de los cosenos haciendo uso de la longitud y latitud. A continuación, vamos a explicar en detalle cómo se ha calculado dicho parámetro en el presente trabajo:

En primer lugar, a partir de la Figura 2b, hemos establecido los valores de latitud y longitud para cada una de las regiones (Tabla A12). Como podemos observar dichas coordenadas tienen unidades de grados, siendo necesaria su conversión a radianes. Para ello, hemos realizado la siguiente conversión, dado que 360° corresponden a 2π radianes:

$$COOR_g(rad) = COOR_g^o \cdot \frac{2\pi}{360^\circ} \quad (34)$$

Donde $COOR_g$, hace referencia al set de longitud y la latitud correspondientes a cada una de las regiones. A continuación, aplicamos la ley esférica de cosenos, la cual se define como:

$$LD_{g,g'} = \cos^{-1} \cdot [\sin(lat_g) \cdot \sin(lat_{g'}) + \cos(lat_g) \cdot \cos(lat_{g'}) \cdot \cos(long_g - long_{g'})] \cdot R \quad (35)$$

donde R hace referencia al radio medio de la Tierra y toma el valor de 6.372,795 [km]. Este modelo esférico asume errores de hasta un 0.3% (es decir, un máximo de 3 km en 1000 km de longitud), este error se considera confiable debido a que la resolución espacial de la metodología propuesta está en el orden de 100 km. Por lo que podemos afirmar que este modelo da resultados aceptables hasta distancias tan pequeñas como unos pocos metros en la superficie terrestre. A

pesar de ello, dado que no se tiene en cuenta la morfología geodésica para el cálculo de dichas distancias, se ha implementado el factor de tortuosidad, explicado anteriormente en la Sec 4.2, para tener en cuenta la presencia de terreno montañoso (Tabla A2).

10.3. Cálculo del coste unitario de transporte $UTC_{p,l}$ [€/tCO₂/km]

Para el cálculo del coste unitario de transporte, $UTC_{p,l}$ en España, tanto para oleoducto mar como para oleoducto tierra se ha representado gráficamente el coste unitario de estos dos modos de transportes frente a los caudales discretizados que se proponen el artículo de d'Amore 2020 [32].

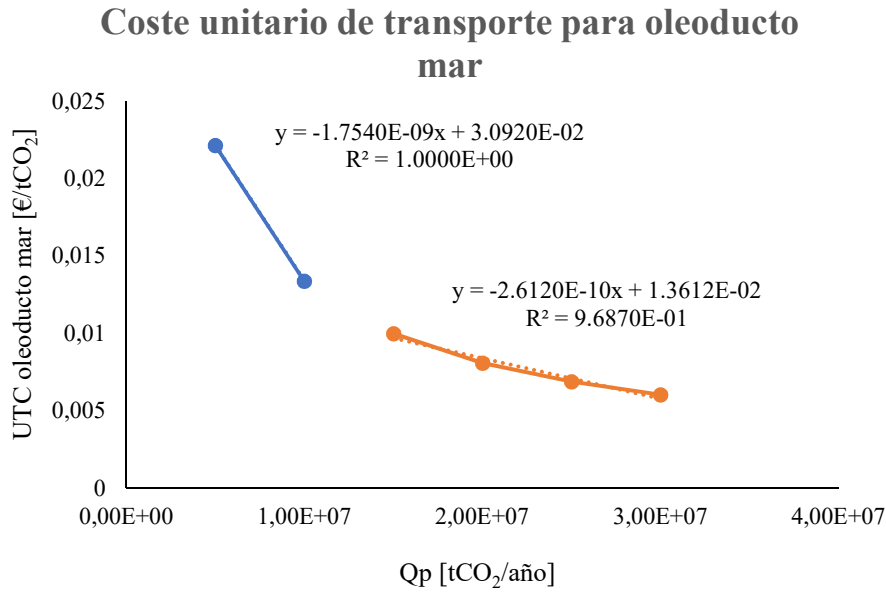


Figura 21: Cálculo de los costes unitarios de transporte para oleoducto mar

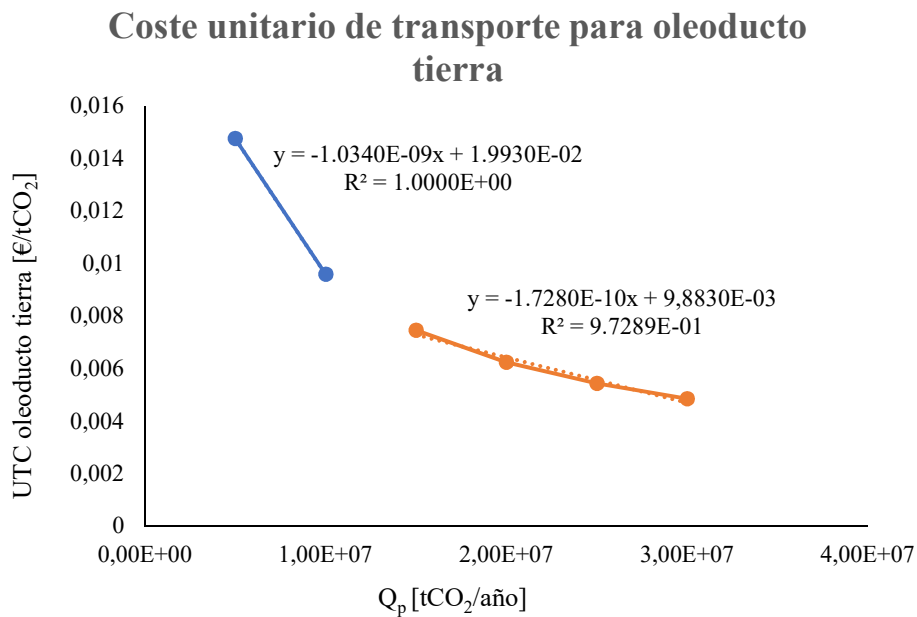


Figura 22: Cálculo de los costes unitarios de transporte para oleoducto tierra

Mediante la representación lineal de los caudales discretizados más cercanos al caudal intermedio de cada intervalo escogido, se ha obtenido el coste unitario para los casos de oleoducto mar y oleoducto tierra, sustituyendo este caudal intermedio en la ecuación de la recta obtenida (Tabla A4). La ecuación de la recta azul se ha utilizado para determinar los costes unitarios de transporte para los primeros intervalos ($p = \{1,2\}$) y la de la recta naranja para los últimos intervalos ($p = \{3,4\}$). Para determinar el coste unitario en europa, no se ha diferenciado entre modo de transporte, por lo que se ha cogido el valor medio del coste unitario de transporte de todos los modos de

transporte entre los intervalos de 1-15 MtCO₂/año ($p = 1$) y de 15-30 MtCO₂/año ($p = 2$) (Tabla A3). Todos los datos para determinar el coste unitario de transporte se han cogido de d'Amore 2020 [32].

10.4. Tablas

Tabla A1: Emisiones anuales CO₂ P_g^{max} [tCO₂/año] en la región g

g	P_g^{max}	g	P_g^{max}	g	P_g^{max}	g	P_g^{max}
1	1290000	32	9348070	63	13192150	94	3046710
2	1080000	33	14906880	64	1960840	95	41507370
3	1144680	34	11737470	65	3682310	96	10841040
4	7865230	35	10607560	66	1773290	97	10345080
5	2494260	36	46180780	67	4172690	98	8156170
6	0	37	139450560	68	2586690	99	13708240
7	1702930	38	45659040	69	3540190	100	1740120
8	1229100	39	25887690	70	10382000	101	3003740
9	1866730	40	95395370	71	28512840	102	9681650
10	0	41	11459350	72	4066880	103	1819290
11	11301630	42	84301600	73	1173490	104	2414730
12	17466470	43	35533760	74	4260670	105	3843380
13	6008420	44	0	75	8954890	106	1960470
14	10501570	45	2486120	76	13562920	107	8295350
15	6600080	46	0	77	0	108	0
16	1583520	47	8718020	78	0	109	4483710
17	0	48	0	79	10356080	110	3024090
18	2056020	49	18738070	80	26587700	111	17201320
19	8033710	50	32921390	81	19327840	112	3431280
20	6513080	51	5030140	82	5996980	113	3090270
21	17353300	52	1677340	83	6554860	114	1052820
22	96493970	53	8040670	84	2068180	115	4715290
23	3037810	54	11645960	85	0	116	5575650
24	17990540	55	7597960	86	8370360	117	0
25	2762050	56	2485580	87	7808270	118	5440290
26	21133830	57	0	88	4178420	119	0
27	0	58	12857000	89	0	120	5629680
28	2812060	59	14223910	90	4232220	121	4815420
29	2662760	60	0	91	12489060	122	0
30	2356030	61	18959480	92	9993730	123	0
31	10183900	62	14016630	93	8161360	124	12616470

Tabla A2: Factor de tortuosidad τ_g , evaluado siguiendo la analogía entre el transporte de CO₂ por tuberías y la transmisión de electricidad. El valor oscila entre un mínimo de 1.00 (región llana) y un máximo de 1.5 (región montañosa) [50].

g	τ_g	g	τ_g	g	τ_g	g	τ_g
1	1	32	1	63	1.3	94	1
2	1	33	1	64	1	95	1
3	1	34	1	65	1	96	1
4	1	35	1	66	1	97	1
5	1	36	1.5	67	1	98	1
6	1	37	1	68	1.3	99	1
7	1	38	1	69	1	100	1
8	1	39	1	70	1	101	1
9	1	40	1.5	71	1.5	102	1.3
10	1	41	1.5	72	1.5	103	1
11	1	42	1	73	1.5	104	1
12	1.5	43	1	74	1.5	105	1.3
13	1	44	1	75	1.5	106	1
14	1	45	1	76	1.5	107	1.3
15	1	46	1	77	1	108	1
16	1	47	1	78	1	109	1
17	1	48	1	79	1	110	1
18	1	49	1	80	1	111	1
19	1	50	1.3	81	1	112	1.3
20	1.5	51	1	82	1	113	1
21	1	52	1	83	1	114	1
22	1	53	1	84	1	115	1
23	1	54	1.3	85	1	116	1
24	1	55	1.5	86	1	117	1
25	1	56	1.3	87	1.3	118	1
26	1	57	1	88	1.5	119	1
27	1	58	1	89	1	120	1
28	1	59	1	90	1.3	121	1
29	1	60	1.5	91	1.3	122	1
30	1	61	1.5	92	1.5	123	1
31	1	62	1.5	93	1.5	124	1

Tabla A3: Coste unitario para diferentes intervalos de Q_p [€/tCO₂/km] para el modelo europeo.

p	Q_p [Mt/año]	UTC_{p,l} [€/tCO₂/km]
1	1-15	0.02645
2	15-30	0.01529

Tabla A4: Coste unitario de transporte $UTC_{p,l}$ según el intervalo de caudal de CO₂ para España.

p	Q_p [Mt/año]	UTC_{p,l}		
		Oleoducto Tierra [€/t/km]	Oleoducto Mar [€/t/km]	Barco [€/t/km]
1	1-5	0.02269	0.03721	0.03215
2	5-10	0.01102	0.01539	0.03215
3	10-20	0.00746	0.00997	0.03215
4	20-30	0.00485	0.00602	0.03215

Tabla A5: Potencial de almacenamiento máximo de CO₂ [tCO₂] en los pozos de inyección en la región g

g	U _g ^{seqmax}	g	U _g ^{seqmax}	g	U _g ^{seqmax}	g	U _g ^{seqmax}
1	0	32	9348070000	63	1574833000	94	0
2	0	33	14906880000	64	0	95	0
3	0	34	11737470000	65	616000000	96	635000000
4	0	35	10607560000	66	9000000000	97	635000000
5	0	36	0	67	0	98	0
6	0	37	0	68	0	99	0
7	0	38	0	69	0	100	0
8	0	39	0	70	0	101	1772375000
9	9250000	40	0	71	0	102	1772375000
10	9250000	41	0	72	1772375000	103	0
11	0	42	0	73	1772375000	104	0
12	0	43	735000000	74	0	105	1574833000
13	0	44	0	75	1574833000	106	1574833000
14	2756000000	45	0	76	0	107	0
15	0	46	0	77	0	108	635000000
16	9250000	47	2897333000	78	0	109	635000000
17	9250000	48	2897333000	79	2120000000	110	0
18	0	49	2897333000	80	0	111	0
19	0	50	0	81	0	112	1772375000
20	4800000000	51	0	82	0	113	0
21	4800000000	52	0	83	0	114	0
22	4800000000	53	853000000	84	0	115	0
23	2340000000	54	1716000000	85	0	116	0
24	4270000000	55	0	86	1772375000	117	0
25	4270000000	56	0	87	1772375000	118	0
26	4270000000	57	0	88	1772375000	119	0
27	4270000000	58	0	89	0	120	0
28	735000000	59	0	90	0	121	0
29	735000000	60	0	91	0	122	0
30	735000000	61	1574833000	92	0	123	0
31	0	62	1574833000	93	0	124	0

Tabla A6. Eficiencia de captura (η_k) y coste unitario de captura para cada una de las tecnologías k .

	k			
	$post_{carbon}^{comb}$	$post_{gas}^{comb}$	oxy_{carbon}^{fuel}	pre^{comb}
η_k	0.87	0.88	0.92	0.86
UCC_k	33	54	36	25

Tabla A7: Precios de gas natural, electricidad, mano de obra ($lab_c[ke/año]$) y tasa de impuesto corporativa (tax_c) en los países estudiados[64], [65], [66], [67].

c	Gas natural	Electricidad	lab_c	tax_c
	[€/kWh]	[€/kWh]	[k€/año]	
Bélgica	0.0244	0.113	55.691	0.34
República Checa	0.0238	0.069	17.480	0.19
Dinamarca	0.0327	0.082	62.756	0.22
Alemania	0.0317	0.152	51.825	0.298
Irlanda	0.0332	0.124	49.660	0.125
Grecia	0.0283	0.107	28.179	0.29
España	0.031	0.106	36.388	0.250
Francia	0.0326	0.099	53.384	0.333
Croacia	0.0246	0.087	16.659	0.2
Italia	0.0271	0.148	43.822	0.24
Lituania	0.0246	0.084	10.263	0.15
Hungría	0.0261	0.074	13.136	0.09
Holanda	0.0365	0.082	56.107	0.25
Polonia	0.0273	0.086	13.227	0.19
Portugal	0.0279	0.114	22.321	0.21
Rumania	0.0255	0.079	7.648	0.16
Eslovaquia	0.0282	0.112	15.205	0.21
Finlandia	0.0441	0.067	50.376	0.2
Inglaterra	0.0248	0.127	47.068	0.19
Macedonia	0.03	0.056	6.626	0.1
Albania	0.0578	0.084	4.626	0.15
Serbia	0.031	0.064	8.404	0.15
Turquía	0.0187	0.063	13.899	0.2
Bosnia	0.0343	0.059	9.702	0.1
Moldavia	0.0263	0.083	3.600	0.12
Ucrania	0.0262	0.039	3.352	0.19

Tabla A8: Coste de materias primas $Raw_{\Psi,g}$ [€/tΨ] para la producción de Ψ en la región g [64], [65], [66], [67], con valores nulos para las celdas $g = \{113 - 118\}$.

g	Ψ		g	Ψ		g	Ψ	
	PPP [€/t]	MeOH [€/t]		PPP [€/t]	MeOH [€/t]		PPP [€/t]	MeOH [€/t]
1	1386.6	326.9	43	1386.6	195.1	85	1386.6	210.1
2	1386.6	326.9	44	1386.6	195.1	86	1386.6	210.1
3	1386.6	326.9	45	1386.6	169.6	87	1386.6	210.1
4	1386.6	326.9	46	1386.6	169.6	88	1386.6	210.1
5	1386.6	326.9	47	1386.6	222.9	89	1386.6	210.1
6	1386.6	326.9	48	1386.6	222.9	90	1386.6	176
7	1386.6	326.9	49	1386.6	222.9	91	1386.6	176
8	1386.6	381.1	50	1386.6	219.4	92	1386.6	176
9	1386.6	326.9	51	1386.6	219.4	93	1386.6	176
10	1386.6	326.9	52	1386.6	166.7	94	1386.6	290.1
11	1386.6	326.9	53	1386.6	166.7	95	1386.6	198.6
12	1386.6	170.2	54	1386.6	170.2	96	1386.6	185.8
13	1386.6	170.2	55	1386.6	170.2	97	1386.6	185.8
14	1386.6	381.1	56	1386.6	169.6	98	1386.6	127.9
15	1386.6	381.1	57	1386.6	169.6	99	1386.6	199.1
16	1386.6	196.8	58	1386.6	169.6	100	1386.6	210.1
17	1386.6	196.8	59	1386.6	222.9	101	1386.6	210.1
18	1386.6	196.8	60	1386.6	222.9	102	1386.6	210.1
19	1386.6	213.1	61	1386.6	176	103	1386.6	210.1
20	1386.6	213.1	62	1386.6	176	104	1386.6	210.1
21	1386.6	170.2	63	1386.6	176	105	1386.6	176
22	1386.6	170.2	64	1386.6	178.3	106	1386.6	176
23	1386.6	256.5	65	1386.6	192.2	107	1386.6	176
24	1386.6	219.4	66	1386.6	184.1	108	1386.6	185.8
25	1386.6	219.4	67	1386.6	184.1	109	1386.6	185.8
26	1386.6	219.4	68	1386.6	184.1	110	1386.6	127.9
27	1386.6	219.4	69	1386.6	165	111	1386.6	127.9
28	1386.6	195.1	70	1386.6	199.1	112	1386.6	210.1
29	1386.6	195.1	71	1386.6	195.1	113	-	-
30	1386.6	195.1	72	1386.6	195.1	114	-	-
31	1386.6	195.1	73	1386.6	195.1	115	-	-
32	1386.6	195.1	74	1386.6	222.9	116	-	-
33	1386.6	170.2	75	1386.6	176	117	-	-
34	1386.6	170.2	76	1386.6	176	118	-	-

35	1386.6	170.2	77	1386.6	176	119	1386.6	176
36	1386.6	169.6	78	1386.6	233.3	120	1386.6	176
37	1386.6	219.4	79	1386.6	233.3	121	1386.6	185.8
38	1386.6	219.4	80	1386.6	197.4	122	1386.6	185.8
39	1386.6	219.4	81	1386.6	184.1	123	1386.6	185.8
40	1386.6	219.4	82	1386.6	184.1	124	1386.6	127.9
41	1386.6	195.1	83	1386.6	184.1			
42	1386.6	195.1	84	1386.6	199.1			

Tabla A9: Coste de los servicios públicos $util_{\Psi,g}$ [€/t Ψ] para la producción de los productos químicos Ψ en la región g [64], [65], [66], [67], con valores nulos en las celdas $g=\{113 - 118\}$.

Ψ			Ψ			Ψ		
g	PPP	MeOH	g	PPP	MeOH	g	PPP	MeOH
	€/t	€/t		€/t	€/t		€/t	€/t
1	3.24	145.4	43	3.08	130.1	85	3.01	128.3
2	3.24	145.4	44	3.08	130.1	86	3.01	128.3
3	3.24	145.4	45	1.92	82.1	87	3.01	128.3
4	3.24	145.4	46	1.92	82.1	88	3.01	128.3
5	3.24	145.4	47	2.92	125.4	89	3.01	128.3
6	3.24	145.4	48	2.92	125.4	90	3.26	135.8
7	3.24	145.4	49	2.92	125.4	91	3.26	135.8
8	5.43	236.4	50	3.77	159.3	92	3.26	135.8
9	3.24	145.4	51	3.77	159.3	93	3.26	135.8
10	3.24	145.4	52	2.26	95.4	94	10.03	393.9
11	3.24	145.4	53	2.26	95.4	95	2.27	98.1
12	3.01	125.5	54	3.03	128.1	96	2.79	117.7
13	3.01	125.5	55	3.03	128.1	97	2.79	117.7
14	5.43	236.4	56	1.92	82.1	98	1.93	79.6
15	5.43	236.4	57	1.92	82.1	99	3.08	130.1
16	2.65	113	58	1.92	82.1	100	3.01	128.3
17	2.65	113	59	2.92	125.4	101	3.01	128.3
18	2.65	113	60	2.92	125.4	102	3.01	128.3
19	3.14	133.8	61	3.26	135.8	103	3.01	128.3
20	3.14	133.8	62	3.26	135.8	104	3.01	128.3
21	3.01	125.5	63	3.26	135.8	105	3.26	135.8
22	3.01	125.5	64	2.5	105.6	106	3.26	135.8
23	2.99	130.5	65	2.51	107.2	107	3.26	135.8
24	3.77	159.3	66	2.46	104.4	108	2.79	117.7
25	3.77	159.3	67	2.46	104.4	109	2.79	117.7

26	3.77	159.3	68	2.46	104.4	110	1.93	79.6
27	3.77	159.3	69	2.33	98	111	1.93	79.6
28	3.08	130.1	70	3.08	130.1	112	3.01	128.3
29	3.08	130.1	71	3.01	128.3	113	3.02	128.4
30	3.08	130.1	72	3.01	128.3	114	3.03	128.5
31	3.08	130.1	73	3.01	128.3	115	3.04	128.6
32	3.08	130.1	74	2.92	125.4	116	3.05	128.7
33	3.01	125.5	75	3.26	135.8	117	3.06	128.8
34	3.01	125.5	76	3.26	135.8	118	3.07	128.9
35	3.01	125.5	77	3.26	135.8	119	3.26	135.8
36	2.81	117.4	78	2.52	110.4	120	3.26	135.8
37	3.77	159.3	79	2.52	110.4	121	2.79	117.7
38	3.77	159.3	80	2.34	100.6	122	2.79	117.7
39	3.77	159.3	81	2.46	104.4	123	2.79	117.7
40	3.77	159.3	82	2.46	104.4	124	1.93	79.6
41	3.08	130.1	83	2.46	104.4			
42	3.08	130.1	84	2.58	107.9			

Tabla A10: Intensidad de emisión de la energía del carbon CI_g [$tCO_2^{Indirecto}/GJ$] en la región g [68] . Las regiones con el mismo valor pertenecen al mismo país.

g	CI_g [t/GJ]	g	CI_g [t/GJ]	g	CI_g [t/GJ]	g	CI_g [t/GJ]
1	0.03133	32	0.21481	63	0.07058	94	0.0025
2	0.03133	33	0.07808	64	0.05833	95	0.40278
3	0.03133	34	0.07808	65	0.07233	96	0.17306
4	0.03133	35	0.07808	66	0.085	97	0.17306
5	0.03133	36	0.04711	67	0.085	98	0.13306
6	0.03133	37	0.12244	68	0.085	99	0.09019
7	0.03133	38	0.12244	69	0.17694	100	0.07372
8	0.03225	39	0.12244	70	0.09019	101	0.07372
9	0.03133	40	0.12244	71	0.07372	102	0.07372
10	0.03133	41	0.21481	72	0.07372	103	0.07372
11	0.03133	42	0.21481	73	0.07372	104	0.07372
12	0.07808	43	0.21481	74	0.01625	105	0.07117
13	0.07808	44	0.21481	75	0.07117	106	0.07117
14	0.03225	45	0.07583	76	0.07117	107	0.07117
15	0.03225	46	0.07583	77	0.07117	108	0.17306
16	0.005	47	0.01625	78	0.13061	109	0.17306
17	0.005	48	0.01625	79	0.13061	110	0.13306
18	0.005	49	0.01625	80	0.10056	111	0.13306

19	0.11803	50	0.12244	81	0.085	112	0.07372
20	0.11803	51	0.12244	82	0.085	113	0.25586
21	0.07808	52	0.02364	83	0.085	114	0.25586
22	0.07808	53	0.14242	84	0.09019	115	0.25586
23	0.14033	54	0.03675	85	0.07372	116	0.25586
24	0.12244	55	0.03675	86	0.07372	117	0.18056
25	0.12244	56	0.07583	87	0.07372	118	0.18056
26	0.12244	57	0.07583	88	0.07372	119	0.07117
27	0.12244	58	0.07583	89	0.07372	120	0.07117
28	0.21481	59	0.01625	90	0.07117	121	0.17306
29	0.21481	60	0.00389	91	0.07117	122	0.17306
30	0.21481	61	0.07117	92	0.07117	123	0.17306
31	0.21481	62	0.07117	93	0.07117	124	0.13306

*Tabla A11: Cuota de emisiones dentro de la celda g para la que se podría emplear la tecnología k, $y_{k,g}$
 $[tCO_2^{coal/gas}/tCO_2^{total}]$ [64].*

g	coal	gas	g	coal	gas	g	coal	gas	g	coal	gas
1	0.71	0.29	32	0.95	0.05	63	0.32	0.68	94	0.00	1.00
2	0.71	0.29	33	0.63	0.37	64	0.51	0.49	95	0.93	0.07
3	0.71	0.29	34	0.63	0.37	65	0.55	0.45	96	0.77	0.23
4	0.71	0.29	35	0.63	0.37	66	0.69	0.31	97	0.77	0.23
5	0.71	0.29	36	0.14	0.86	67	0.69	0.31	98	0.47	0.53
6	0.71	0.29	37	0.81	0.19	68	0.69	0.31	99	0.61	0.49
7	0.71	0.29	38	0.81	0.19	69	0.00	1.00	100	0.51	0.39
8	0.79	0.21	39	0.81	0.19	70	0.61	0.39	101	0.51	0.39
9	0.71	0.29	40	0.81	0.19	71	0.51	0.49	102	0.51	0.39
10	0.71	0.29	41	0.95	0.05	72	0.51	0.49	103	0.51	0.39
11	0.71	0.29	42	0.95	0.05	73	0.51	0.49	104	0.51	0.49
12	0.63	0.37	43	0.95	0.05	74	0.54	0.46	105	0.32	0.68
13	0.63	0.37	44	0.95	0.05	75	0.32	0.68	106	0.32	0.68
14	0.79	0.21	45	0.77	0.23	76	0.32	0.68	107	0.32	0.68
15	0.79	0.21	46	0.77	0.23	77	0.32	0.68	108	0.77	0.23
16	0.00	1.00	47	0.54	0.46	78	0.99	0.01	109	0.77	0.23
17	0.00	1.00	48	0.54	0.46	79	0.99	0.01	110	0.47	0.53
18	0.00	1.00	49	0.54	0.46	80	0.97	0.03	111	0.47	0.53
19	0.41	0.59	50	0.81	0.19	81	0.69	0.31	112	0.51	0.49
20	0.41	0.59	51	0.81	0.19	82	0.69	0.31	113	0.51	0.49
21	0.63	0.37	52	0.91	0.09	83	0.69	0.31	114	0.51	0.49
22	0.63	0.37	53	0.91	0.09	84	0.61	0.39	115	0.51	0.49

23	0.34	0.66	54	0.62	0.38	85	0.51	0.49	116	0.51	0.49
24	0.81	0.19	55	0.62	0.38	86	0.51	0.49	117	0.51	0.49
25	0.81	0.19	56	0.77	0.23	87	0.51	0.49	118	0.32	0.68
26	0.81	0.19	57	0.77	0.23	88	0.51	0.49	119	0.32	0.68
27	0.95	0.05	58	0.77	0.23	89	0.51	0.49	120	0.32	0.68
28	0.95	0.05	59	0.54	0.46	90	0.32	0.68	121	0.77	0.23
29	0.95	0.05	60	0.54	0.46	91	0.32	0.68	122	0.77	0.23
30	0.95	0.05	61	0.32	0.68	92	0.32	0.68	123	0.77	0.23
31	0.95	0.05	62	0.32	0.68	93	0.32	0.68	124	0.47	0.53

Tabla A12: Valores de $Latitud_g$ y $Longitud_g$ para cada una de las regiones g

g	$Latitud_g$	$Longitud_g$	g	$Latitud_g$	$Longitud_g$	g	$Latitud_g$	$Longitud_g$
1	64	21.5	43	51.5	21.5	85	41.5	-6
2	64	24	44	51.5	24	86	41.5	-3.5
3	64	26.5	45	51.5	26.5	87	41.5	-1
4	61,5	21.5	46	51.5	29	88	41.5	1.5
5	61,5	24	47	49	1.5	89	41.5	4
6	61,5	26.5	48	49	4	90	41.5	9
7	61,5	29	49	49	6.5	91	41.5	11.5
8	59	11.5	50	49	9	92	41.5	14
9	59	24	51	49	11.5	93	41.5	16.5
10	59	26.5	52	49	14	94	41.5	19
11	59	29	53	49	16.5	95	41.5	21.5
12	56.5	-3.5	54	49	19	96	41.5	24
13	56.5	-1.5	55	49	21.5	97	41.5	26.5
14	56.5	9	56	49	24	98	41.5	29
15	56.5	11.5	57	49	26.5	99	39	-8.5
16	56.5	24	58	49	29	100	39	-6
17	56.5	26.5	59	46.5	4	101	39	-3.5
18	56.5	29	60	46.5	6.5	102	39	-1
19	54	-8.5	61	46.5	9	103	39	1.5
20	54	-6	62	46.5	11.5	104	39	4
21	54	-3.5	63	46.5	14	105	39	9
22	54	-1	64	46.5	16.5	106	39	14
23	54	6.5	65	46.5	19	107	39	16.5
24	54	9	66	46.5	21.5	108	39	21.5
25	54	11.5	67	46.5	24	109	39	24
26	54	14	68	46.5	26.5	110	39	26.5
27	54	16.5	69	46.5	29	111	39	29

28	54	19	70	44	-8.5	112	36.5	-6
29	54	21.5	71	44	-6	113	36.5	-1
30	54	24	72	44	-3.5	114	36.5	1.5
31	54	26.5	73	44	-1	115	36.5	4
32	54	29	74	44	6.5	116	36.5	6.5
33	51.5	-3.5	75	44	9	117	36.5	9
34	51.5	-1	76	44	11.5	118	36.5	11.5
35	51.5	1.5	77	44	14	119	36.5	14
36	51.5	4	78	44	16.5	120	36.5	16.5
37	51.5	6.5	79	44	19	121	36.5	21.5
38	51.5	9	80	44	21,5	122	36.5	24
39	51.5	11.5	81	44	24	123	36.5	26.5
40	51.5	14	82	44	26.5	124	36.5	29
41	51.5	16.5	83	44	29			
42	51.5	19	84	41.5	-8.5			

Tabla A13: Matrices de los coeficientes de pendiente y de intercepción de los costes de capital de las instalaciones para producir cada producto químico Ψ [57].

	FCI$_{\Psi}$		η_{Ψ}^R	η_{Ψ}^C	EEC$_{\Psi}$
	Slope	Intercept			
	[€/t]	[M€]			
PPP	33.96	20.97	0.228	0.6500	0.3754
MeOH	79.79	229.02	1.370	0.9385	29.4000

Cantidad de carbono η_{Ψ}^R [t de CO2 de entrada a la etapa de conversión / t de sustancia química] que reacciona y se convierte para generar una sustancia química. Eficiencia de conversión del carbono, η_{Ψ}^C [t de CO2 capturado / t de CO2 de entrada a la etapa de conversión] en la producción de sustancias químicas. Consumo de energía eléctrica EEC $_{\Psi}$ [GJ / t de CO2 de entrada a la etapa de conversión] para la producción de productos químicos.

10.5. Gráficas complementarias España y Europa.

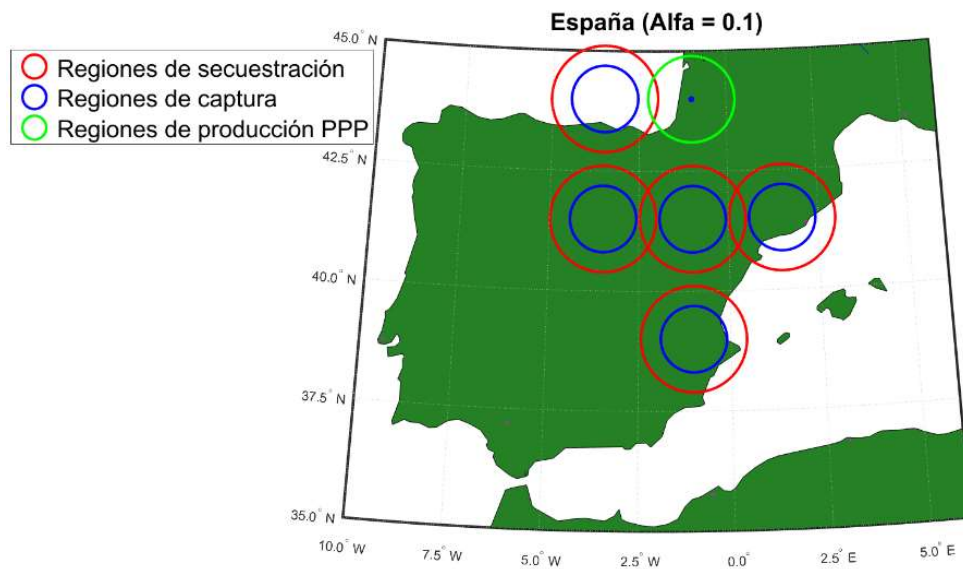


Figura 23. Configuración final CS España para $\alpha=0.1$

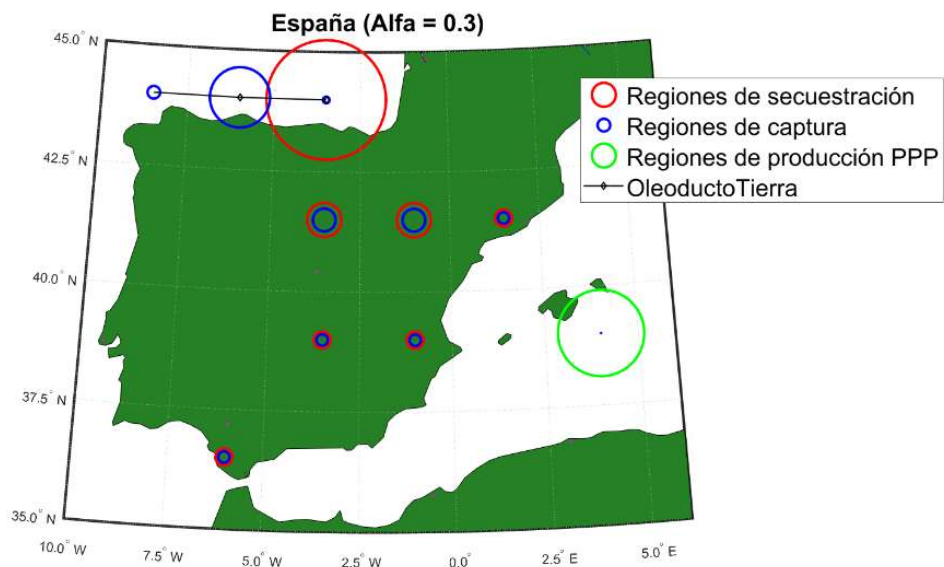


Figura 24. Configuración final CS España para $\alpha=0.3$

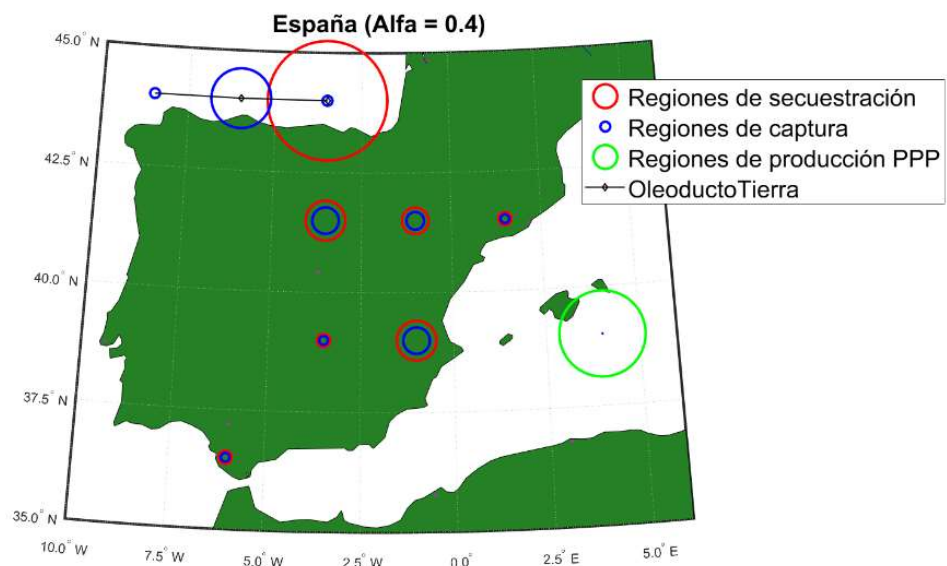


Figura 185. Configuración final CS España para $\alpha=0.4$

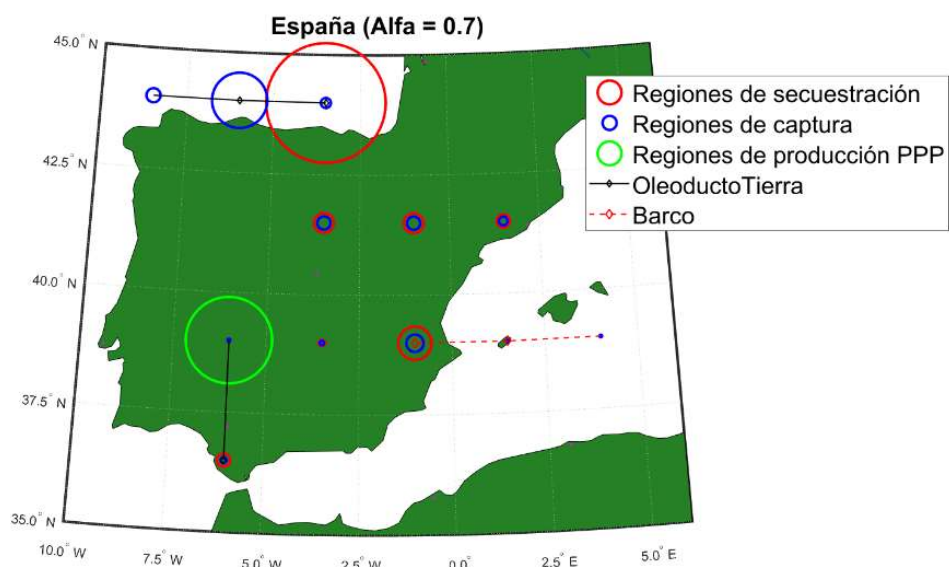


Figura 26. Configuración final CS España para $\alpha=0.7$

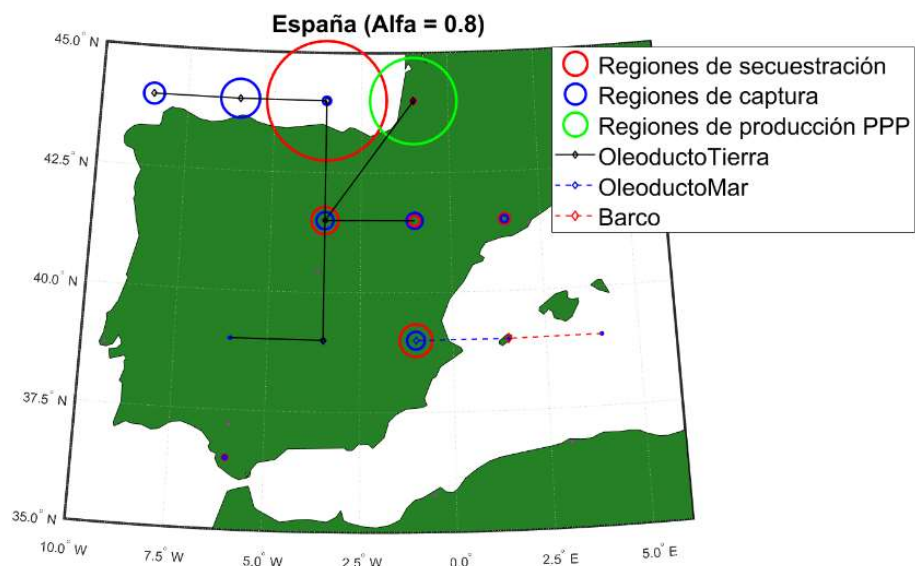


Figura 27. Configuración final CS España para $\alpha=0.8$

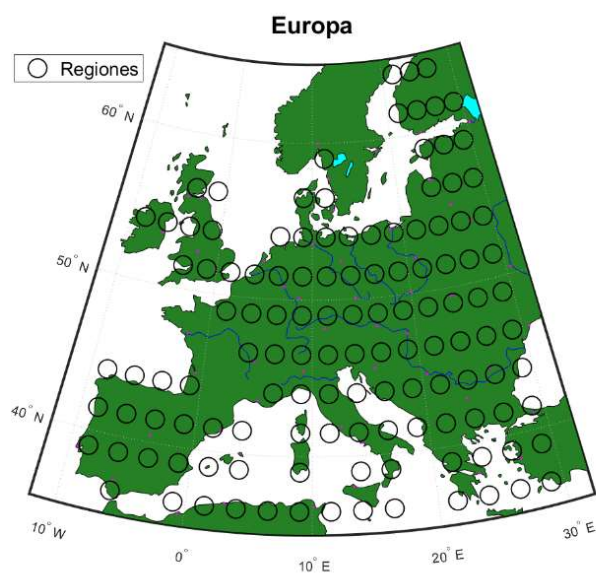


Figura 28. Fuentes estacionarias europeas de emisiones.

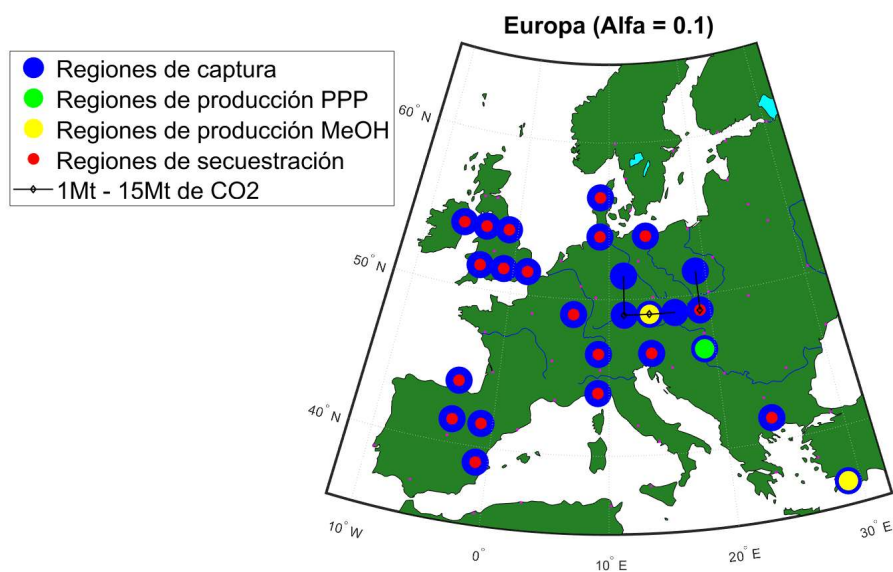


Figura 29. Configuración final CS Europa para $\alpha=0.1$.

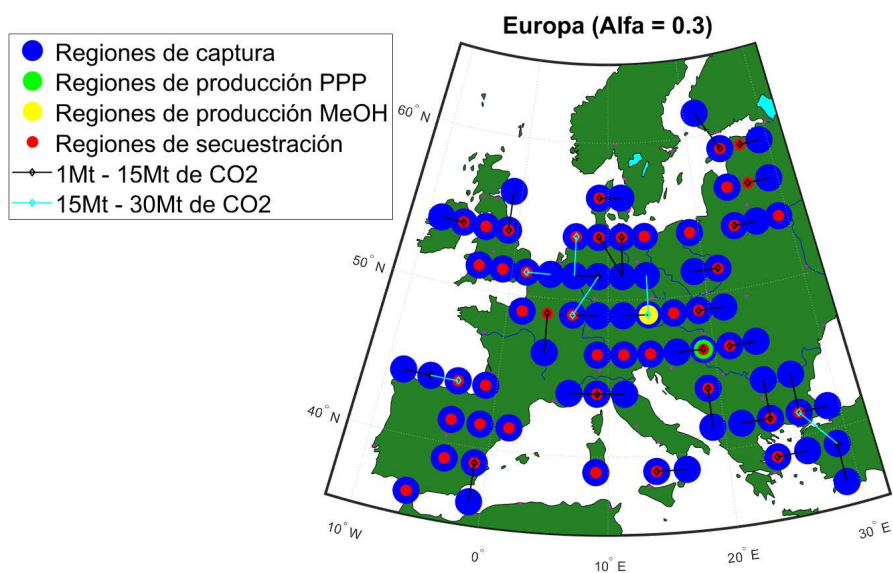


Figura 30. Configuración final CS Europa para $\alpha=0.3$

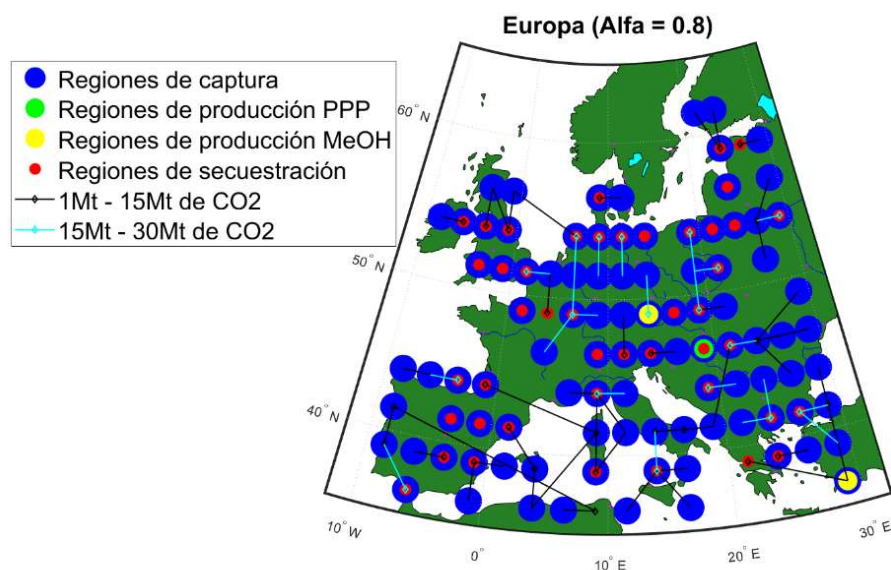


Figura 31. Configuración final CS Europa para $\alpha=0.8$

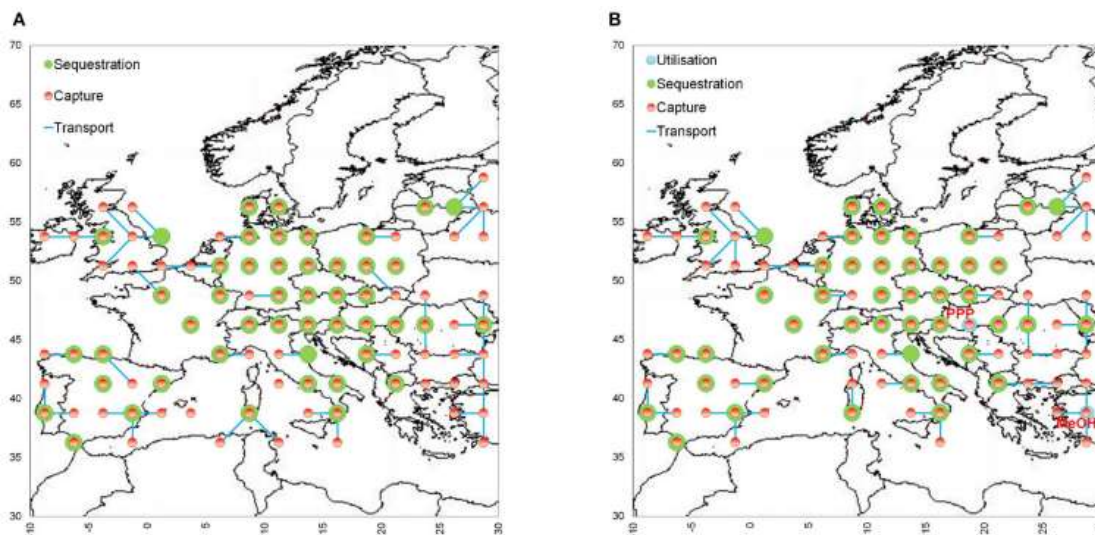


Figura 32. Configuración final por d'Amore (2020) (A) Escenario 0 y (B) Escenario A_{D1}

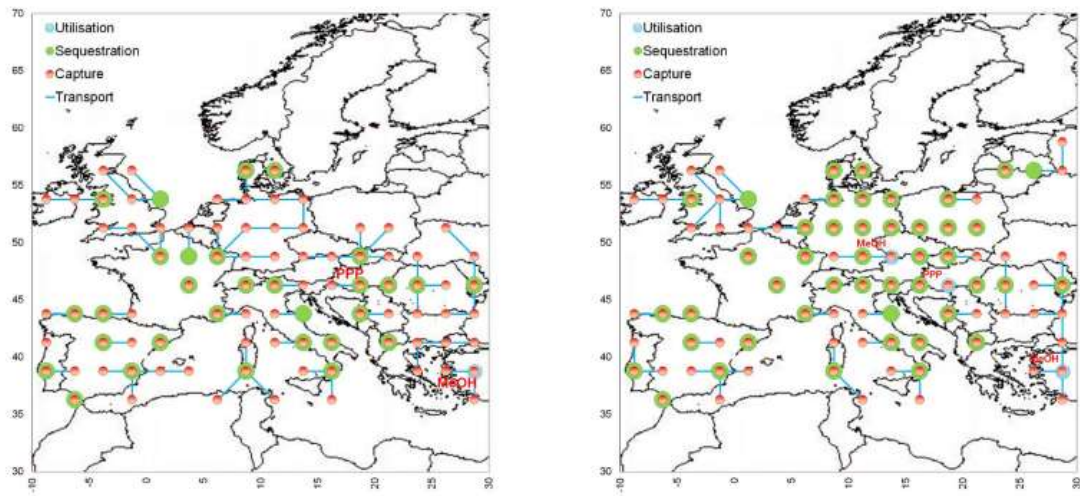


Figura 33. Configuración final por d'Amore (2020) (A) Escenario B y (B) Escenario C

10.6. Tablas complementarias

Tabla A14: Valores obtenidos para la optimización de la CS CCUS a nivel europeo para los diferentes escenarios estudiados, considerando un $\alpha=0.5$.

Escenario	α	Total $CO_2^{Procesado}$ [MtCO ₂]	$C_{k,g}$ [MtCO ₂]	$Q_{g,l,g'}$ [MtCO ₂]	U_g^{Seq} [MtCO ₂]	$U_{\psi,g}^{conv}$ [MtCO ₂]
0	0.5	687.38	594.36	222.22	594.36	0
A ₁	0.5	687.38	593.99	234.33	575.64	16.99
A ₂	0.5	687.56	595.19	194.36	558.48	33.97
A ₃	0.5	687.61	594.83	189.31	539.76	50.96
B	0.5	688.08	597.12	418.03	578.76	16.99
C	0.5	688.28	595.55	230.59	577.20	16.99

Tabla A15: Valores obtenidos para la optimización de la CS CCUS a nivel europeo para los diferentes valores de α estudiados.

α	Total $CO_2^{Procesado}$ [MtCO ₂]	$C_{k,g}$ [MtCO ₂]	$Q_{g,l,g'}$ [MtCO ₂]	U_g^{Seq} [MtCO ₂]	$U_{\psi,g}^{conv}$ [MtCO ₂]
0.05	70.17	60.48	17.11	42.12	16.99
0.1	138.75	119.75	46.43	101.40	16.99
0.15	207.68	179.03	89.83	160.68	16.99
0.2	275.82	238.32	89.21	219.96	16.99
0.25	343.93	297.60	109.55	279.24	16.99
0.3	412.43	356.88	168.6	338.52	16.99
0.4	549.91	478.56	250.02	460.20	16.99
0.5	688.06	603.36	298.22	585.00	16.99
0.6	824.86	725.04	399.91	706.68	16.99
0.7	962.34	835.80	422.29	817.44	16.99
0.8	1099.82	954.36	571.62	936.00	16.99
0.9	1237.29	1076.04	665.99	1057.68	16.99